

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université Ahmed Draia Adrar



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département Hydrocarbures et Energies Renouvelables

Support de Cours et Exercices corrigés

Génie de la réaction chimique 1

Présenté par :

Dr. Mounir SAKMECHE

Année Universitaire 2022/2023

1. Plan Pédagogique du cours

- **Matière** : Génie de la réaction chimique I
- **Filière** : Génie des procédés
- **Niveau** : Master 1 : Génie chimique
- **Volume Horaire** : 45h Cours (1h :30) + Travaux Pratiques (1h :30)
- **Coefficient** : 4
- **Crédits** : 2
- **Evaluation** : Contrôle continu : 40% ; Examen : 60%.

2. Objectifs de l'enseignement:

L'étudiant aura acquis des connaissances concernant l'hydrodynamique dans les réacteurs réels ou non-idéaux, les principaux modèles de réacteurs homogènes et des notions sur le fonctionnement des bioréacteurs.

3. Connaissances préalables recommandées:

Connaissances des notions de base en cinétique chimique, en thermodynamique en phénomènes de transfert et en réacteurs homogènes idéaux.

4. Contenu de la matière:

Chapitre 1 : Réacteurs non- idéaux (7semaines)

- notions fondamentales (introduction et définitions)
- Modélisation des réacteurs : notion des distributions des temps de séjour (DTS) ,
- identification des réacteurs, réacteurs non isothermes, réacteurs adiabatiques, modèles simples : réacteur piston à dispersion axiale, modèles à plusieurs paramètres, états d'agrégation (micro et macro mélange).

Chapitre 2 Bioréacteurs (8semaines)

- Classification et caractéristiques des bioréacteurs
- Transfert de matière dans les bioréacteurs : couplage transfert- réaction,
- mécanisme et cinétique des réactions enzymatiques homogènes et hétérogènes
- Mode de fonctionnement des bioréacteurs (réacteurs continus parfaitement agités, réacteurs à lit fixe, réacteurs à lit fluidisé, réacteurs membranaires).

Partie 1

Notions du cours sur Génie de la réaction 1

Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

Connaissances requises :

→ Grandeurs de composition d'un mélange réactionnel

en système fermé et en système ouvert en régime permanent

→ Paramètres d'avancement d'une réaction chimique simple (à stœchiométrie unique)

- ▶ *La variable chimique ξ*
- ▶ *Le taux de conversion X_c*
- ▶ *L'avancement généralisé X*

→ Le concept de «réacteur idéal »

Les réacteurs idéaux sont des configurations réactionnelles simples, où les conditions hydrodynamiques et physiques sont supposées idéalisées et bien déterminées :

- ▶ *Cuve parfaitement agitée, écoulement piston, perte de charge et phénomènes de diffusion négligeables, absence de gradients de concentration et de température.*

Notions de temps de séjour (t_s) et de temps de passage (τ)

→ Bilans de matière dans les réacteurs idéaux

Type de réacteur idéal	Bilans de constituants	Equations caractéristiques (aux avancements)	Temps de passage	Volumes Débits
Réacteur fermé uniforme RF	$\frac{dn_j}{dt} = v_j r V$	$n_0 \frac{dX}{dt} = r V$		$V = \beta V_0(1 + \alpha X)$
Réacteur agité continu (régime permanent) RA	$v_j r = \frac{F_{jS} - F_{jE}}{V_R}$	$\frac{r_s}{F_0} = \frac{X_S - X_E}{V_R}$	$\tau = \frac{V_R}{Q_0} = C_0 \frac{X_S - X_E}{r_s}$	$Q = \beta Q_0(1 + \alpha X)$
Réacteur piston (régime permanent) RP	$\frac{dF_j}{dV_R} = v_j r$	$\frac{r}{F_0} = \frac{dX}{dV_R}$	$\tau = \frac{V_R}{Q_0} = C_0 \int_{X_E}^{X_S} \frac{dX}{r}$	

→ Combinaison de réacteurs idéaux

- ▶ Association en série, association en parallèle
- ▶ Réacteur piston à recyclage

Objectifs du cours :

- Etudier les distributions de temps de séjour (DTS) dans les systèmes en écoulement ;
- Comment utiliser la DTS pour tirer des informations concernant le fonctionnement hydrodynamique du réacteur ;
- Comment utiliser ces informations, conjointement à la connaissance de la cinétique chimique de la réaction, pour prévoir les performances du réacteur.

Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

Nous avons vu dans la matière « Réacteurs homogènes » que la description du fonctionnement en régime permanent des réacteurs « idéaux », fait appel à deux types d'écoulement simples :

- L'écoulement « **piston** » caractérisé par un temps de séjour unique pour toutes les molécules ;
- L'écoulement en « **mélange parfait** » où les temps de séjours sont à priori quelconques (une distribution des temps de séjour) et où l'on suppose la composition uniforme en tout point.

Nous avons vu également que la conversion, le rendement et les comportements thermiques des réacteurs piston et agités continu sont très différents. Nous avons vu aussi que des associations de réacteurs idéaux permettent de représenter des situations intermédiaires entre le mélange parfait et l'écoulement piston. On en conclut que de faibles écarts au comportement idéal peuvent être responsables d'écarts notables de conversion, de rendement ou de stabilité thermique.

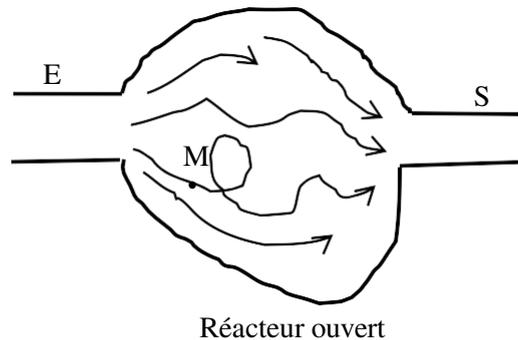
Le but est donc de caractériser et quantifier ces écarts et leurs conséquences, à deux niveaux :

- A l'échelle du réacteur pour appréhender le rôle macroscopique de l'écoulement sur ses performances ou interpréter des expériences de laboratoire. C'est le problème de **macromélange** et c'est l'objet du premier et deuxième chapitre.
- A l'échelle microscopique pour appréhender le rôle du mode de mise en contact des réactifs. C'est le problème de **micromélange** et c'est l'objet du troisième chapitre.

Dans un réacteur réel, les molécules séjournent dans le volume réactionnel pendant des temps t_s qui dépendent du profil hydrodynamique et de la géométrie du réacteur.

Il existe donc une *distribution des temps de séjour*, et cette dispersion a une influence sur les performances chimiques du réacteur.

Description des écoulements réels : concepts d'âge, d'espérance de vie et de temps de séjour.



- **L'âge interne α de la molécule** : le temps qui s'est écoulé depuis qu'elle a franchi la surface d'entrée du réacteur.
- **Son espérance de vie λ** : le temps qui lui reste à passer dans le réacteur avant de franchir la surface de sortie.
- **Son temps de séjour t_s** : le temps qu'elle aura passé au total dans le réacteur.

Remarque :

- ▶ Le temps de séjour n'est que l'âge interne dans le courant de sortie.
- ▶ On a d'une manière générale : $t_s = \alpha + \lambda$

Le nombre de molécules étant suffisamment grand dans le réacteur, on peut décrire cette population en terme statistique par des fonctions de distribution.

Les principales fonctions de distribution

Nous allons définir trois fonctions de distributions dans des systèmes d'écoulement auxquels s'appliquent les hypothèses restrictives suivantes :

1. l'écoulement est en régime permanent ;
2. l'écoulement est déterministe (pas de basculement de filets ni de créations de tourbillons à grand échelle de temps et d'espace ;

3. le fluide est incompressible ;
4. l'écoulement à travers les sections d'entrée E et de sortie S se fait uniquement par convection forcée, à l'exclusion de toute diffusion et de mélange en retour ;
5. les conduites d'entrée et de sortie sont de petit diamètre devant les dimensions du réacteur et l'écoulement y est de type piston.

La fonction de distribution des âges internes globale I

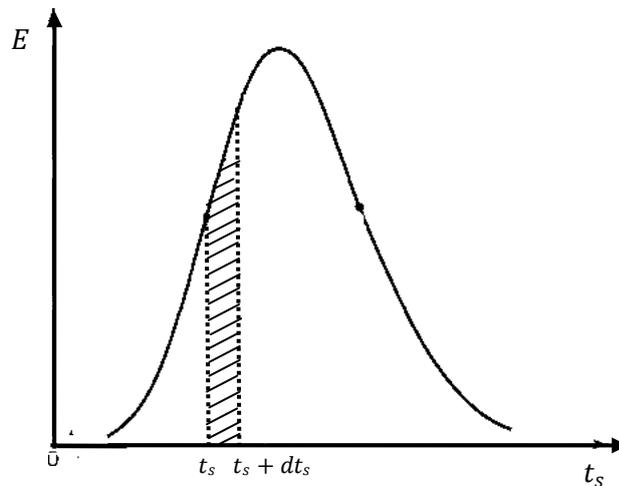
La distribution des âges internes globale $I(\alpha)$ est telle que $I(\alpha)d\alpha$ est la fraction du **volume interne** contenant des molécules d'âge compris entre α et $\alpha + d\alpha$.

$\int_0^{t_1} I(\alpha)d\alpha$ représente la fraction des molécules « plus jeunes » que t_1 dans le réacteur.

La distribution des temps de séjours (DTS)

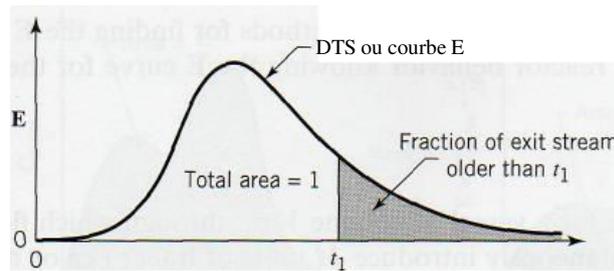
Plaçons-nous dans l'hypothèse 1,2 et 4.

La fonction la plus importante est la distribution des temps de séjour (DTS) que l'on note $E(t_s)$. Elle est définie telle que $E(t_s) dt_s$ est la fraction du débit de fluide sortant composé de molécules qui ont passé un temps compris entre t_s et $t_s + dt_s$.



La fonction $E(t_s)$ est par définition, une fonction **normée**. Ce qui implique que :

$$\int_0^{\infty} E(t_s) dt_s = 1$$



Remarques :

1. La quantité $\int_{t_1}^{\infty} E(t) dt$ représente la fraction de fluide ayant séjourné plus longtemps que t_1 dans le réacteur.
2. La quantité $\int_0^{t_1} E(t) dt = 1 - \int_{t_1}^{\infty} E(t) dt$ représente la fraction de fluide ayant un temps de séjour compris entre 0 et t_1 .
3. $E(t_s)$ a la dimension de t^{-1} .

Les moments statistiques de la fonction $E(t_s)$

On peut définir des moments statistiques pour chacune des distributions définies précédemment. Ceux de la DTS ont une importance particulière. On les désigne par les lettres μ et ν .

- Le moment d'ordre n autour de l'origine est défini par :

$$\mu_n = \int_0^{\infty} t^n E(t) dt \quad (I.1)$$

En particulier, le moment d'ordre 1 : $\mu_1 = \bar{t}$ est la moyenne ou temps de séjour moyen dans le réacteur.

- Le moment d'ordre n autour de la moyenne, ou moment centré est défini par :

$$\nu_n = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^n E(t) dt \quad (I.2)$$

En particulier :

- $\nu_2 = \mu_2 - \mu_1^2 = \sigma^2$ est la variance de la distribution qui caractérise son étalement autour de la moyenne.
- ν_3 marque l'asymétrie de la distribution.
- ν_4 marque son aplatissement etc.

Détermination expérimentale de la DTS au moyen de traceurs. Le réacteur en tant que système linéaire.

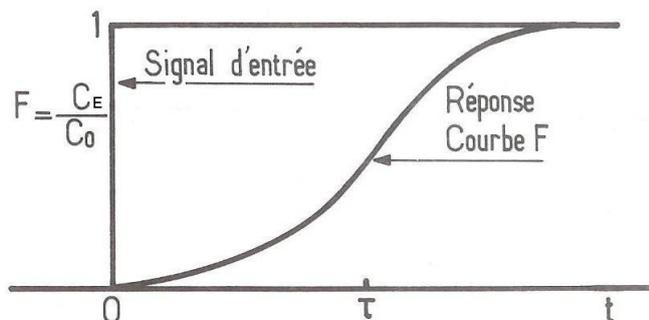
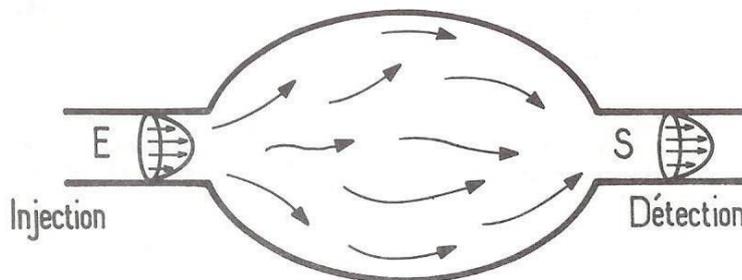
La méthode des traceurs consiste à marquer les molécules entrant dans le réacteur, et à suivre leur histoire jusqu'à la sortie, en particulier de les dénombrer dans le courant de sortie en fonction du temps. Pour cela, on utilise un traceur qui peut être un traceur radioactif, un colorant ou toute substance de même propriétés hydrodynamique que le fluide, mais décelable par une propriété physique caractéristique telle la conductibilité électrique, thermique, etc.

On applique à l'aide du traceur un certain signal à l'entrée du réacteur, de manière à ne pas perturber le régime d'écoulement, et on examine sa réponse à la sortie. On en déduit des enseignements sur le comportement interne du fluide.

Il est préférable d'injecter et de détecter le traceur dans des zones rétrécies où règne un fort critère de Reynolds donc une turbulence spontanée assurant la condition de mélange.

Injection-échelon ou Purge-échelon : la courbe F

Dans une injection-échelon, la concentration de traceur passe brusquement de 0 à C_0 dans l'alimentation à l'instant $t = 0$.



Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

Dans une purge-échelon, l'injection permanente et établie de traceur est brusquement interrompue à l'instant $t = 0$.

– Expression de I en fonction de F

Supposons le fluide incompressible (hypothèse 3) et plaçons-nous à un instant t après une injection-échelon.

La fraction de volume interne occupé par du fluide marqué est celle qui est plus jeune que t soit :

$$\int_0^t I(\alpha) d\alpha$$

La fraction de débit marqué, dans le courant de sortie, est celle qui a un temps de séjour plus petit que t , soit : $\int_0^t E(t_s) dt_s$

Le bilan de matière du traceur s'écrit :

$$QC_0 = Qc + \frac{d}{dt} \left[V_R \int_0^t I(\alpha) d\alpha \right] C_0 \quad (I.3)$$

Ou encore :

$$C_0 = c + \frac{V_R}{Q} \frac{d}{dt} \left[C_0 \left(\int_0^t I(\alpha) d\alpha \right) \right]$$

On obtient alors :

$$1 = F + \tau I(t) \quad (I.7) \quad \text{ou} \quad \boxed{I = \frac{(1-F)}{\tau}} \quad (I.4)$$

– Expression de E en fonction de F

On fait une injection-échelon à $t = 0$. Le fluide coloré remplace progressivement le fluide incolore. Ecrivons qu'à $t > 0$, la quantité de fluide coloré qui existe dans le réacteur est égale à la quantité de fluide incolore sortie depuis $t = 0$. On obtient :

$$V_R \int_0^t I(\alpha) d\alpha = \int_0^t Q dt' \left[\int_{t'}^{\infty} E(t_s) dt_s \right]$$

En dérivant par rapport à t , on obtient :

$$V_R I(t) = Q(t) \int_t^{\infty} E(t_s) dt_s$$

$$\text{Ou encore : } V_R I(t) = Q \left[1 - \int_0^t E(t_s) dt_s \right]$$

$$\text{Ce qui donne : } \tau I(t) = 1 - \int_0^t E(t_s) dt_s \quad \text{ou encore} \quad I(t) = \frac{(1 - \int_0^t E(t_s) dt_s)}{\tau} \quad (I.5)$$

Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

La combinaison des relations (I.8) et (I.9) donne : $F = \int_0^t E(t) dt$ (I.6)

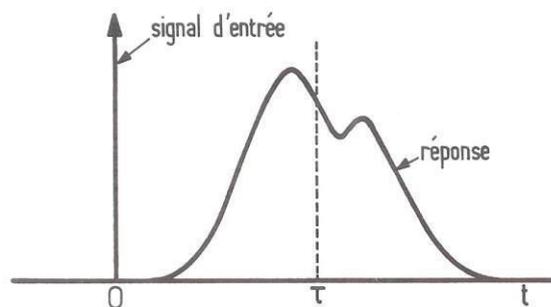
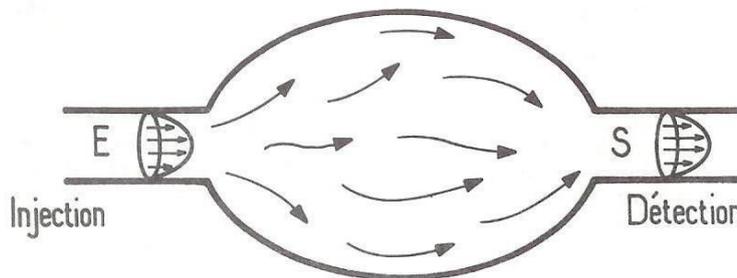
La réponse à une injection-échelon est **la courbe** $F = \frac{c(t)}{c_0}$ mais donne aussi accès aux fonctions de distribution : $I = \frac{(1-F)}{\tau}$, et $E = \frac{dF}{dt}$

La réponse à une purge-échelon dessine directement la forme de **I**

Injection-Impulsion (de type Dirac)

L'expérience consiste à injecter une quantité donnée de traceur (disons n moles) à l'entrée du réacteur, pendant un temps très court devant le temps de passage τ ($< 0,01\tau$).

$$\delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \neq 0 \\ \infty & \text{si } t = 0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t) dt = 1$$



Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

– Expression de E en fonction de C

A l'instant t, la quantité de traceur qui est sortie du réacteur depuis le début de l'expérience est celle qui a un temps de séjour inférieur à t :

$$\int_0^t Qc dt = n \int_0^t E(t) dt \quad (I.7)$$

On obtient :

$$Qc(t) = nE(t) \quad (I.8)$$

Posons $C_0 = \frac{n}{V_R}$: concentration qu'aurait le traceur uniformément réparti dans tout le volume.

La relation (I.12) devient :

$$\frac{1}{\tau} \frac{c(t)}{C_0} = E(t)$$

On obtient la DTS :

$$E(t) = \frac{1}{\tau} C(t)$$

$$(I.9) \quad \text{avec la fonction } C(t) = \frac{c(t)}{C_0}$$

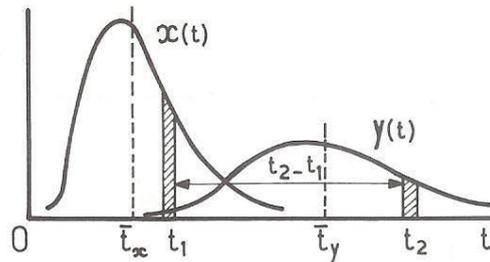
La DTS apparaît ainsi comme la réponse à une injection-impulsion de type Dirac

Injection de forme quelconque. Le réacteur en tant que système linéaire

Un système est dit **linéaire** lorsque les variables d'entrée et de sortie sont reliées par un ensemble d'équations différentielles ou aux dérivées partielles **linéaires**. On peut appliquer dans ce cas le principe de superposition habituel : la réponse à une somme de perturbations est égale à la somme des réponses à chaque perturbation agissant seule.

Le signal de concentration de traceur à la sortie du réacteur suite à une injection de forme quelconque peut donc être considéré comme la réponse d'un système linéaire à une perturbation du signal d'entrée. Soient, un signal de concentration $x(t)$ à l'entrée et la réponse correspondante $y(t)$ en sortie. Nous considérons les signaux normés par $S = \frac{n}{Q}$ De sorte que :

$$\int_0^\infty x(t) dt = \int_0^\infty y(t) dt = 1$$



La contribution de l'impulsion élémentaire $x(t_1) dt_1$, à la réponse au temps t_2 , est, par définition la réponse impulsionnelle : $dy = x(t_1) dt_1 \cdot E(t_2 - t_1)$.

En sommant sur tous les temps t_1 de 0 à t_2 , on obtient :

$$y(t_2) = \int_0^{t_2} x(t_1) \cdot E(t_2 - t_1) \cdot dt_1 \quad (\text{I.10})$$

Cette intégrale exprime que y est le **produit de convolution** de x par E : $y = x * E$

Introduisons les transformées de Laplace :

$$X(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} x(t) dt \quad , \quad Y(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} y(t) dt \quad \text{et} \quad \int_0^{\infty} e^{-st} E(t) dt = G(s) \quad (\text{I.11})$$

$G(s)$ est la fonction de transfert du réacteur.

La relation (I.10) se traduit dans le domaine de Laplace par :

$$Y(s) = X(s) \cdot G(s) \quad (\text{I.12})$$

Relation de Van der Laan :

Comparant la définition des moments (I.4) et celle de la fonction de transfert (I.15) et dérivons n fois cette dernière relation par rapport à s . En passant à la limite $s \rightarrow 0$, on établit la relation de Van der Laan :

$$\mu_n = (-1)^n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^n G}{\partial s^n} \quad (\text{I.13})$$

Cette relation est très utile car elle permet de trouver l'expression des moments de la DTS à partir d'un modèle mathématique sans revenir dans le domaine réel. Comme les premiers moments de la DTS sont accessibles à partir de l'expérience, on dispose ainsi d'une méthode d'identification des paramètres des modèles d'écoulement très utilisée dans la pratique.

Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

Soient \bar{t} , \bar{t} , σ_x^2 et σ_y^2 les moyennes et les variances des signaux d'entrée et de sortie. En appliquant la relation de Van Der Laan à la relation (I.16), on établit les relations suivantes :

$$t_s = \bar{t} - t_x \quad \text{et} \quad \sigma^2 = \sigma_y^2 - \sigma_x^2 \quad (\text{I.14})$$

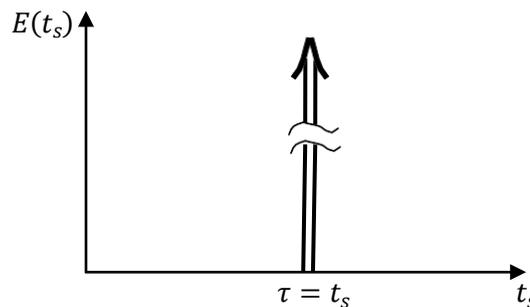
L'opération qui consiste à tirer $E(t)$ d'un couple (x, y) à partir de (I.14) ou (I.16) s'appelle une **déconvolution**.

Distribution des temps de séjour dans les réacteurs idéaux-fluide incompressible

Réacteur piston

Un réacteur piston se comporte comme un retard pur. Toutes les molécules ont le même temps de séjour $\bar{t}_s = \tau = \frac{V_R}{Q}$. La DTS est un pic très étroit situé au temps τ , soit :

$$E(t_s) = \delta(t_s - \tau) \quad (\text{I.15})$$

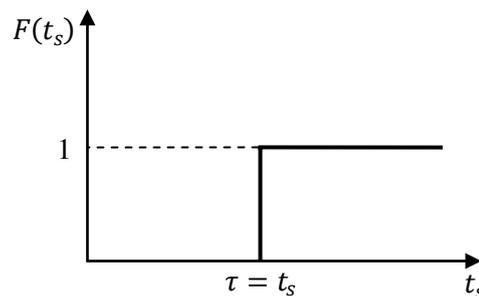


La réponse à un échelon-unité est un échelon-unité décalé de τ dans le temps, soit :

$$F(t_s) = H(t_s - \tau) \quad (\text{I.16})$$

Où H est la fonction échelon-unité de Heaviside.

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t < 0 \\ 1 & \text{pour } t \geq 0 \end{cases}$$



$$t_s = \int_0^{\infty} t \delta(t - \tau) dt = \tau \quad [\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \delta(x - \tau) dx = g(\tau)]$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \delta(t - \tau) dt = 0$$

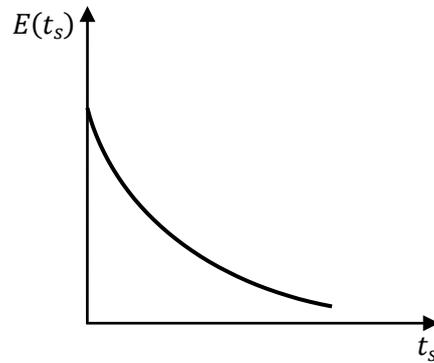
Réacteur parfaitement agité continu

Pour établir l'expression de $E(t_s)$, cherchons la réponse à une injection-impulsion. Introduisons une quantité de traceur (n moles) dans le réacteur. La concentration monte instantanément à $C_0 = \frac{n}{V_R}$, puis évolue suivant l'équation :

$$0 = Qc + V_R \frac{dc}{dt}$$

On en déduit facilement :

$$C(t) = \frac{c}{c_0} = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$



D'où l'on établit d'après (I.9) la DTS

$$E(t_s) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t_s}{\tau}\right) \quad (\text{I.17})$$

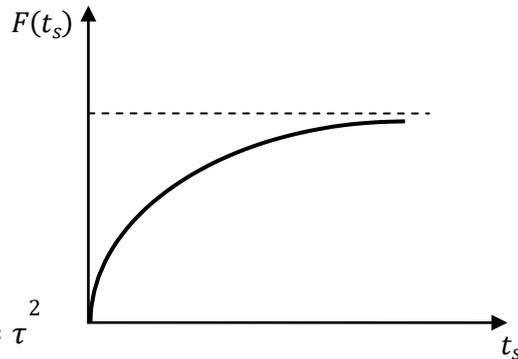
Et la fonction F (la fonction intégrale) :

$$F(t_s) = \int_0^{t_s} E(t) dt$$

$$F = 1 - \exp\left(-\frac{t_s}{\tau}\right) \quad (\text{I.18})$$

$$t_s = \int_0^{\infty} \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t_s}{\tau}\right) dt_s = \tau$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} \frac{(t_s - \tau)^2}{\tau} e^{-\frac{t_s}{\tau}} dt_s = \tau^2 \int_0^{\infty} (x - 1)^2 e^{-x} dx = \tau^2$$



Réacteur quelconque

Dans un réacteur réel où l'écoulement est de type quelconque, on observe en général des courbes intermédiaires entre les deux comportements limites (R.E.P et R.P.A.C).

Exemple : Réacteur tubulaire en écoulement laminaire établi (modèle des filets en parallèles, voir chapitre II)

Interprétation hydrodynamique des mesures de DTS. Diagnostic de mauvais fonctionnement

Supposons que les 5 hypothèses énoncées précédemment soient vérifiées.

Si tout le volume interne V_R est accessible au fluide, il est simple de montrer que le temps de passage $\tau = \frac{V_R}{Q}$ est égal au temps de séjour moyen \bar{t}_s :

Démonstration :

Le temps de séjour d'un filet (modèle des filets parallèles) est : $t_s = \frac{dV_R}{dQ}$

Et comme $E(t) dt = \frac{dQ}{Q}$, il en résulte que : $\frac{dV_R}{Q} = t E(t) dt$, en intégrant sur tous les filets :

$$\int_0^\infty \frac{dV_R}{Q} = \int_0^\infty t E(t) dt \quad \text{soit : } \frac{V_R}{Q} = \tau = \bar{t}_s \quad (\text{I.19})$$

Considérons maintenant une injection-impulsion dans un réacteur (fermé à la diffusion) et parcouru en régime permanent par un fluide incompressible.

Soit $y(t)$ le relevé expérimental de la courbe $C(t)$ en *unités arbitraire*, par exemple sur une bande d'enregistrement.

Plusieurs renseignements peuvent être obtenus à partir d'une telle mesure, suivant la richesse des informations (données) dont on dispose :

1. On ne connaît ni la quantité de traceur injectée, ni la concentration absolue à la sortie. On ne dispose que de $y(t)$.

On calcule la surface S sous la courbe : $S = \int_0^\infty y(t) dt$

La DTS est obtenue par normation : $E(t) = \frac{y(t)}{S}$ (I.20)

On peut en déduire le temps de séjour moyen : $\bar{t}_s = \frac{1}{S} \int_0^\infty t y(t) dt$ (I.21)

2. on connaît de plus la quantité n de traceur injectée et le détecteur de sortie est **étalonné en concentration absolue** $y(t) = C(t)$.

On déduit le débit volumique de l'expression de n : $n = \int_0^\infty Q c dt = Q \int_0^\infty c dt = Q S$

d'où : $Q = \frac{n}{S}$ (I.22)

On calcule ensuite le volume accessible au fluide V_a à partir du temps de séjour moyen déterminé comme suit : $V_a = Q \bar{t}_s$ (I.23)

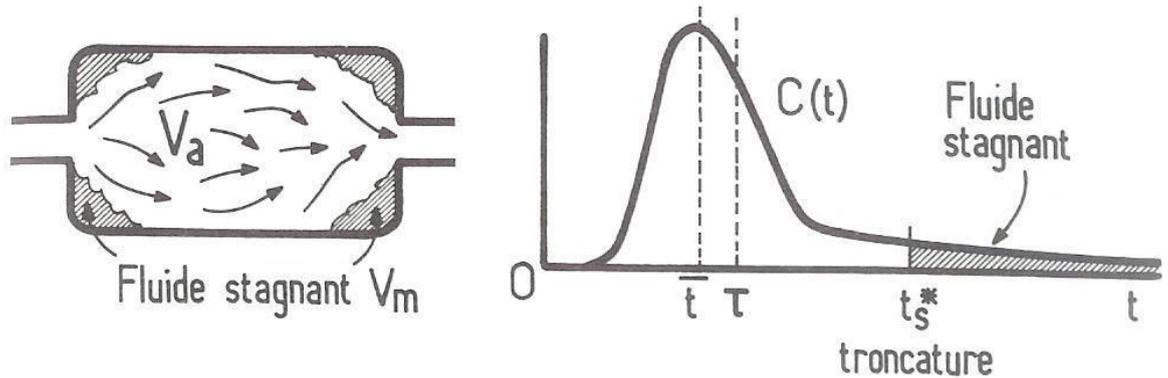
Cette méthode s'avère très précieuse dans l'étude d'appareils industriels ou de milieux naturels où il n'y a parfois pas d'autre moyen d'accéder à ces grandeurs.

Chapitre I : Distribution des temps de séjour (DTS)

3. On connaît en outre le volume géométrique V_R du réacteur et le débit par des mesures directes. On peut ainsi calculer $\tau = \frac{V_R}{Q_0}$ et le comparer à \bar{t}_s .

- ▶ Si $\bar{t}_s < \tau$, ceci peut être l'indice de l'existence d'un volume mort ou stagnant V_m tel que $V_R = V_a + V_m$ d'où : $\frac{V_m}{V_R} = 1 - \frac{\bar{t}_s}{\tau}$ (I.24)

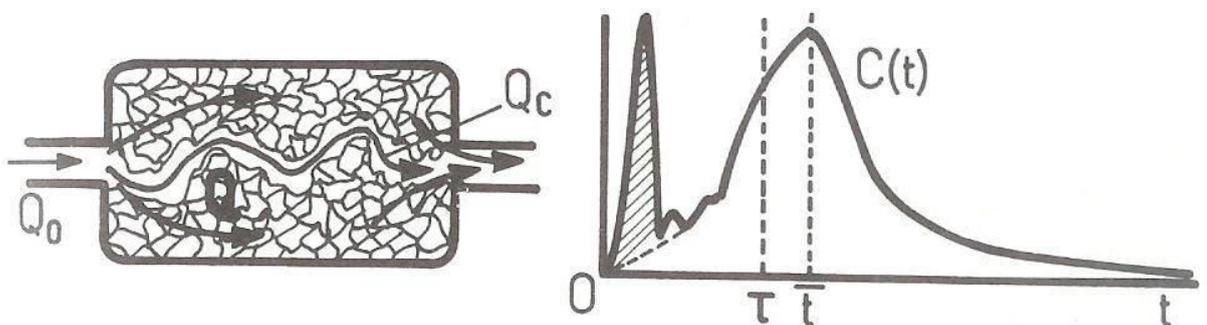
S'il y a un lent échange de fluide entre le volume accessible et le volume stagnant, la courbe $y(t)$ présente **une traînée**.



- ▶ Si $\bar{t}_s > \tau$, ceci peut signifier qu'il existe un court-circuit, et que le pic initial correspondant au débit de court-circuit Q_c a échappé à l'enregistrement :

$$Q_0 = Q + Q_c \quad \text{et} \quad \frac{Q_c}{Q_0} = 1 - \frac{\tau}{\bar{t}_s} \quad (\text{I.25})$$

Il faut alors refaire l'injection en portant son attention sur les tous premiers instants de la réponse. S'il s'agit d'une injection-impulsion, on observe un pic de court-circuit sortant immédiatement. La surface rapportée à la surface totale sous la courbe donne $\frac{Q_c}{Q_0}$



Enfin ces quelques indications montrent que les mesures de DTS à l'aide de traceurs constituent un outil de diagnostic très précieux, qui donne accès à des paramètres difficiles à mesurer par des méthodes directes. Industriellement, lorsque l'état du mélange réactionnel interdit les mesures physico-chimiques in-situ (suspension, bouillie agressives, etc.), on a recours à des traceurs

radioactifs (à des doses compatibles avec les normes de sécurité). Les **émetteurs** γ se prêtent en particulier à une détection à travers les parois du réacteur ou des canalisations.

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Méthodologie

Ayant obtenu par la méthode des traceurs une courbe expérimentale de DTS, on se pose en général le problème de rendre compte de l'allure observée au moyen d'un *modèle hydrodynamique simple*, utilisable facilement par la suite pour prédire la conversion et pour servir de base pour l'extrapolation du réacteur. La démarche peut être résumée par les étapes suivantes :

1. Détermination, par la méthode des traceurs, de la courbe expérimentale de DTS du réacteur réel faisant l'objet de la modélisation.

$$\longrightarrow E_{exp.}(t_s)$$

2. Proposer un modèle hydrodynamique (ou modèle d'écoulement) avec son schéma de circulation. Cette étape nécessite une bonne connaissance du fonctionnement du réacteur réel (observation du réacteur).
3. Etablir l'expression de la DTS du modèle hydrodynamique (écriture des bilans de traceur en régime transitoire).

$$\longrightarrow E_{théor.}(t_s, \mathbf{p}_i) \quad \text{ou} \quad G(s, \mathbf{p}_i) \quad \text{selon le cas}$$

Avec \mathbf{p}_i les paramètres du modèle qui sont à *déterminer*

4. Détermination des valeurs des \mathbf{p}_i à partir de l'expression des moments en résolvant les équations :

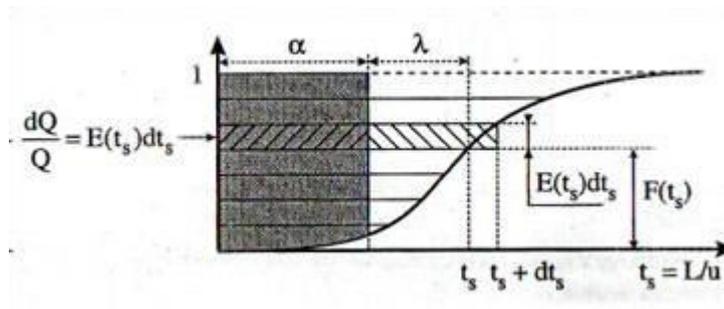
$$(\mu_n)_{exp.} = (\mu_n)_{théor.}(\mathbf{p}_i)$$

5. Prédire la conversion de la réaction dans le réacteur (écriture des bilans de réactif dans le modèle en régime permanent et calcul de la conversion).

Modèle des filets en parallèle

On peut se représenter le fluide en écoulement dans le volume libre V_R avec un débit Q comme formé d'une multitude de filets en écoulement piston caractérisés chacun par un temps de parcours (ou temps de séjour) t_s . Classons par la pensée ces filets par temps de séjour croissant et empilons-les en parallèle de façon que le fluide entre simultanément dans tous les filets et ressort progressivement à des temps croissants de bas en haut. Nous obtenons la figure ci-dessous.

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel



Par définition de la DTS, le filet de temps de séjour compris entre t_s et $t_s + dt_s$ est alimenté par une fraction du débit total Q donnée par :

$$E(t_s) dt_s = \frac{dQ}{Q}$$

De ce fait, le filet de temps de séjour t_s est situé à la « hauteur » normalisée :

$$\frac{\Delta Q}{Q} = \int_0^{t_s} E(t) dt$$

Autrement dit, l'enveloppe des extrémités des filets dessine la courbe $F(t)$. Ce modèle simple permet aussi de visualiser les molécules de fluide *dans* le réacteur et par conséquent de définir leur âge interne, α , espérance de vie, λ , tels que $\alpha + \lambda = t_s$, et les distributions de ces grandeurs. Par exemple, la fraction de volume occupé par du fluide d'âge inférieur à α est le rapport de la surface grisée de la figure précédente à la surface totale comprise entre la courbe F et son asymptote. La distribution des âges internes, $I(t)$, est telle que $I(t)dt$ est la fraction de volume occupé par du fluide d'âge compris entre t et $t + dt$. On a alors :

$$\frac{\int_0^\alpha (1-F) dt}{\int_0^\infty (1-F) dt} = \frac{\int_0^\alpha (1-F) dt}{\bar{t}_s} = \int_0^\alpha I(t) dt \quad \text{ou} \quad I(\alpha) = \frac{1-F(\alpha)}{\bar{t}_s} = \frac{1}{\bar{t}_s} \int_0^\infty E(t_s) dt_s$$

Exemple :

Le modèle des filets en parallèle est une image fidèle de la réalité pour un écoulement laminaire. Établir l'expression de $E(t_s)$ pour un fluide incompressible s'écoulant dans une conduite cylindrique. Si on désirait effectuer une mesure de DTS, quelle difficulté rencontrerait-on pour injecter le traceur ? Que serait la distribution, $E'(t_s)$, si le détecteur était sensible à la *concentration moyenne* dans la section du tube et non au *débit moyen* de traceur ? Calculer les temps de séjour moyen avec E et E' .

Modélisation du réacteur agité continu réel par association de réacteurs idéaux

Pour tenir compte de certaines caractéristiques de l'écoulement comme :

- Des zones intensément mélangées, bien représentées par un mélangeur idéal ;
- Des recyclages ou des courts-circuits qui peuvent être représentés par les lignes idéales reliant les éléments d'un schéma de circulation ;
- Des zones plus ou moins mortes échangeant de la matière avec d'autres zones participant davantage à l'écoulement.

On est amené à proposer un ou plusieurs modèles obtenus par une association judicieuse de réacteurs idéaux. Le réacteur réel est alors représenté par un schéma de circulation dont les éléments ne sont pas des unités réelles, mais des éléments caractéristiques de l'état hydrodynamique de certaines régions du fluide. Les différents modèles de la figure ci-dessous emploient cette approche pour représenter un réacteur agité continu réel dont la conception pose problème :

- La sortie du fluide s'opère par surverse en l'absence de chicane qui forcerait la sortie du fluide du fond de la cuve.
- Le mobile d'agitation, situé assez haut, n'assure pas de brassage en fond de cuve.

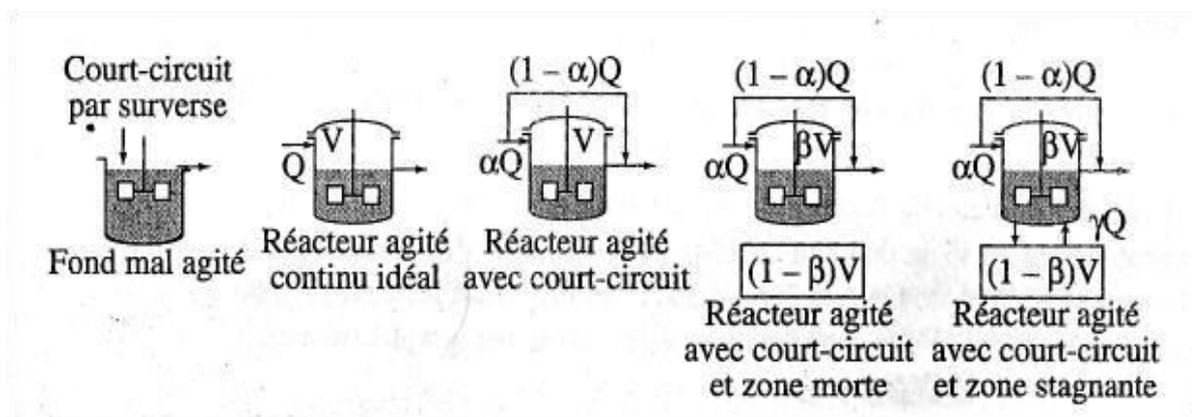


Figure : réacteur agité continu réel (à gauche) et quatre modèles hydrodynamiques

Les quatre modèles représentent l'écoulement de manière plus ou moins détaillée. Outre le « réalisme » du modèle, le niveau de détail se mesure par le nombre de paramètres du modèle inconnus, a priori :

- Le modèle le plus simple consiste à assimiler le réacteur réel à un réacteur agité continu idéal. Il n'y a qu'un paramètre inconnu, $\frac{V}{Q}$, qui s'obtient aisément par une mesure de DTS. C'est toutefois un modèle grossier incapable de rendre compte du court-circuit et du fluide stagnant en fond de cuve.

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

- Le second modèle rend compte du court-circuit mais ignore le fluide stagnant. Il comporte deux paramètres inconnus, α fraction de débit actif, et le temps de séjour moyen dans le mélangeur proprement dit $\frac{V}{\alpha Q}$.
- Le troisième modèle rend compte du court-circuit et d'un volume de fluide inaccessible $(1 - \beta)V$. Toutefois, il ne comporte que deux paramètres inconnus, α et $\frac{\beta V}{\alpha Q}$, temps de séjour moyen dans la zone accessible, hors court-circuit. Ce n'est en fait qu'une variante du modèle précédent.
- Le quatrième modèle est le plus détaillé car il rend compte d'un échange de fluide entre la zone agitée continue idéale et la zone stagnante, Ce modèle comporte quatre paramètres inconnus, $\alpha, \frac{V}{\alpha Q}$, temps de séjour moyen hors court-circuit, β et γQ , débit de recyclage entre les zones.

Au moyen des bilans de matière en régime transitoire et des bilans aux nœuds, il est possible d'accéder à la transformée de Laplace de $E(t)$. Il est ensuite facile d'en déduire l'expression théorique des moments par le théorème de Van der Laan : $\mu_n = (-1)^n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^n G}{\partial s^n}$

Le tableau ci-dessous présente les expressions $G(s), \bar{t}_s, \sigma^2$, et éventuellement $E(t)$ en fonction de $\tau = \frac{V}{Q}$, α, β et γ .

$G(s)$	\bar{t}_s	σ^2	$E(t)$
$\frac{1}{1 + \tau s}$	τ	τ^2	$\frac{e^{-t/\tau}}{\tau}$
$1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\tau s}{\alpha}}$	τ	$\tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right)$	$(1 - \alpha)\delta(t) + \frac{\alpha^2}{\tau} e^{-\alpha t/\tau}$
$1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\beta \tau s}{\alpha}}$	$\beta \tau$	$\beta^2 \tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right)$	$(1 - \alpha)\delta(t) + \frac{\alpha^2}{\beta \tau} e^{-\alpha t/\beta \tau}$
$1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{1 + \tau s \frac{1 + \beta(1 - \beta) \frac{\tau s}{\gamma}}{1 + (1 - \beta) \frac{\tau s}{\gamma}}}$	τ	$\tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 + \frac{2(1 - \beta)^2}{\gamma} \right)$	[-]

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Ce tableau appelle les remarques suivantes :

- Plus le modèle est détaillé, plus les paramètres sont nombreux et les expressions analytiques lourdes. L'emploi d'un programme de calcul formel pour le calcul des moments d'ordre supérieur à 1 par le théorème de Van der Laan est particulièrement recommandé.
- Ces modèles étant purement conceptuels, leurs paramètres ne sont pas accessibles par des mesures spécifiques. Seul l'accord entre la DTS théorique et la DTS expérimentale permet de les déterminer par ajustement numérique. Il est alors évident que plus le nombre de paramètres, inconnus, est élevé, plus leur détermination est difficile et *imprécise*.

Les deux derniers modèles sont en principe identiques quand $\gamma = 0$. Toutefois, on constate que les expressions du temps de séjour moyen sont différentes. Ceci résulte du fait que le volume accessible au fluide est βV dans le modèle 3, et V dans le modèle 4, quel que soit γ , sauf 0. Ce type de désaccord entre modèles *dans des cas limites* est fréquent.

Modélisation du réacteur tubulaire

Ces réacteurs sont généralement proches de l'écoulement piston idéal. Toutefois, les écarts au comportement idéal (mélange entre tranches successives de fluide) et la perte de charge sont deux caractéristiques qui requièrent d'être détailler.

Leurs DTS sont généralement des courbes en cloche d'autant plus étroites que l'écoulement est plus proche du piston idéal. Les deux modèles *écoulement piston avec dispersion* et *cascade de mélangeurs parfaits* sont les plus utilisés pour décrire ce type de DTS.

Le modèle à dispersion axiale (à 1 paramètre)

Dans les modèles dispersifs les plus simples et les plus courants, les variables descriptives du réacteur sont supposées uniformes dans une section droite. L'écart à l'écoulement piston est représenté par un *processus de dispersion* obéissant à la loi de Fick.

Equation de bilan (par rapport au traceur)

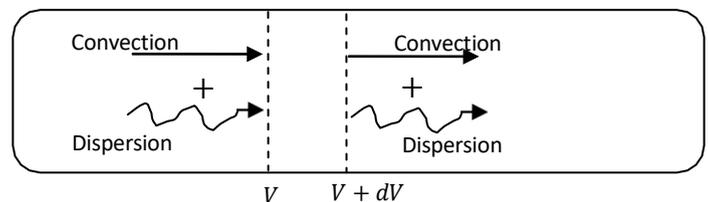
$$D_A \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \bar{u} \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial t}$$

Sous forme adimensionnelle : $X = \frac{z}{L}$,

$$C^* = \frac{c}{c_0} \quad , \quad \theta = \frac{t}{\tau}$$

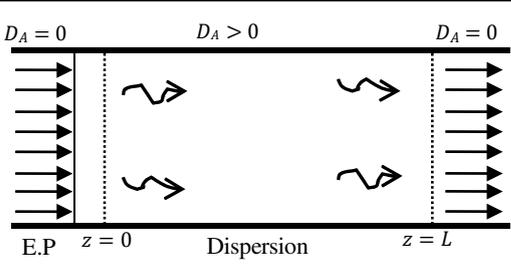
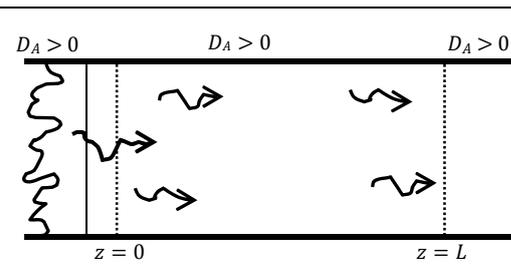
$$\frac{\partial^2 C^*}{\partial X^2} - P \frac{\partial C^*}{\partial X} = P \frac{\partial C^*}{\partial \theta} \quad \text{avec} \quad P = \frac{\bar{u}L}{D_A} : \text{le critère de Peclet}$$

La solution $C^*(X, \theta)$ dépend des conditions aux limites (3 types de conditions aux limites).



Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Le tableau ci-dessous résume les expressions de μ_1 et σ^2 de $E(\theta) = C^*(1, \theta)$ résultat de l'intégration.

Type de conditions aux limites	\bar{t}_s	σ^2
 <p style="text-align: center;"><i>Fermé à la dispersion</i></p>	τ	$\tau^2 \left[\frac{2}{P} - \frac{2}{P^2} (1 - e^{-P}) \right]$
 <p style="text-align: center;"><i>Ouvert à la dispersion</i></p>	$\left(1 + \frac{2}{P}\right) \tau$	$\tau^2 \left(\frac{2}{P} + \frac{8}{P^2} \right)$
<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;"> <p><i>Semi ouvert à la dispersion en amont</i></p> </div> <div style="text-align: center;"> <p><i>Semi ouvert à la dispersion en aval</i></p> </div> </div>	$\left(1 + \frac{1}{P}\right) \tau$	$\tau^2 \left(\frac{2}{P} + \frac{3}{P^2} \right)$

Remarques importantes :

- 1- lorsque l'écart à l'écoulement piston est faible ($P > 100$), les DTS correspondant aux différentes conditions sont quasiment indiscernables (identiques). La DTS s'approche beaucoup d'une gaussienne :

$$E(t_s, P) = \frac{1}{2\tau} \sqrt{\frac{P}{\pi}} \cdot \exp \left[-\frac{P(\tau - t_s)^2}{4\tau^2} \right]$$

*DTS du modèle à dispersion axiale faible.
Le paramètre du modèle est le nombre de Peclet, P*

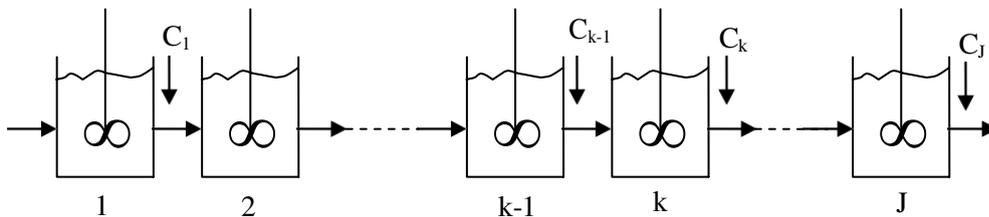
$$E(\theta, P) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{P}{\pi}} \cdot \exp \left[-\frac{P(1-\theta)^2}{4} \right]$$

DTS réduite du modèle.

$$E(\theta) = \tau E(t_s)$$

2- lorsque P est nettement inférieur à 100 (P de l'ordre de 10), les conditions aux limites commencent à intervenir fortement et il faut se reporter aux expressions exactes. Mais l'utilisation du modèle à dispersion n'est pas toujours justifiée physiquement aux très faibles valeurs de P .

Le modèle des mélangeurs en cascades (à 1 paramètre)



Méthode des moments

Le bilan transitoire de traceur dans un mélangeur de rang k de la cascade s'écrit :

$$Q C_{k-1} = Q C_k + \frac{V_R}{J} \frac{dC_k}{dt}$$

Ce qui correspond à la fonction de transfert :

$$\frac{C_k}{C_{k-1}} = g(s) = \frac{1}{(1 + \frac{\tau}{J}s)}$$

De proche en proche, pour toute la cascade :

$$G(s, J) = \left(1 + \frac{\tau}{J}s\right)^{-J}$$

Fonction de transfert du modèle des mélangeurs en cascade.

Le paramètre du modèle est :

J (le nombre de mélangeurs dans la cascade).

μ_1 et σ^2 sont obtenues en utilisant la relation de Van der Laan :

$$\mu_1 = t_s = (-1) \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial G}{\partial s}, \quad \mu_2 = (-1)^2 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2},$$

avec $\sigma^2 = \mu_2 - \mu_1^2$

$$t_s = \tau \quad \sigma^2 = \frac{\tau^2}{J}$$

Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

Remarque :

L'inverse de $G(s)$ (l'original dans le domaine du temps réel) est la DTS. C'est une distribution Gamma (ou de Poisson) :

$$E(t_s, J) = \left(\frac{J}{\tau}\right)^J \cdot \frac{t_s^{J-1}}{(J-1)!} \cdot \exp\left(-\frac{J}{\tau} t_s\right)$$

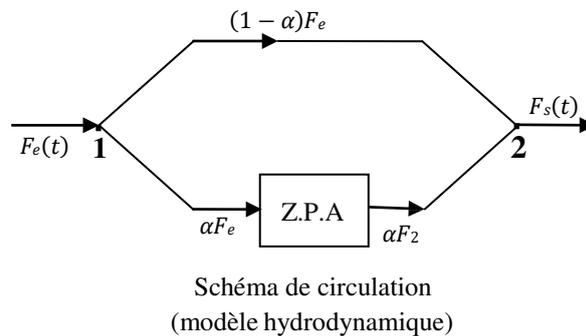
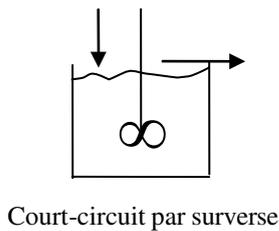
*DTS du modèle des mélangeurs en cascade.
Le paramètre du modèle est :
J (le nombre de mélangeurs dans la cascade).*

Annexe

A. 1 Modélisation du réacteur agité continu réel

1. Modèle à un paramètre

Exemple : Réacteur agité avec court-circuit



Méthode des moments

$G(s)$ du modèle hydrodynamique ?

$$G(s) = \frac{F_s}{F_e} \quad \bar{F}_s : \text{la T.L de } F_s, \quad \bar{F}_e : \text{la T.L de } F_e$$

$$F_s(t) = ? \quad \text{bilan au nœud 2 : } (1 - \alpha)F_e + \alpha F_2 = F_s \quad \text{sa T.L est : } (1 - \alpha)\bar{F}_e + \alpha \bar{F}_2 = \bar{F}_s$$

$$G(s) = \frac{(1-\alpha)F_e + \alpha F_2}{F_e}, \quad G(s) = (1 - \alpha) + \alpha \frac{F_2}{F_e}$$

avec $\frac{F_2}{F_e} = G_1(s)$? la fonction de transfert de la Z.P.A

bilan de matière dans la Z.P.A :

$$\alpha F_e = \alpha F_2 + \frac{d}{dt}(C_2 V), \quad \alpha F_e = \alpha F_2 + V \frac{d}{dt} \left(\frac{\alpha F_2}{\alpha Q} \right), \quad \alpha F_e = \alpha F_2 + \alpha \frac{V}{\alpha Q} \frac{dF_2}{dt}$$

sa T.L est :

$$\alpha \bar{F}_e = \alpha \bar{F}_2 + \alpha \frac{\tau}{\alpha} [s \bar{F}_2 + F_2(t=0)], \quad \alpha \bar{F}_e = \alpha \bar{F}_2 \left(1 + \frac{\tau s}{\alpha} \right), \quad \frac{\alpha F_2}{\alpha F_e} = \frac{1}{1 + \frac{\tau s}{\alpha}} = G_1(s)$$

Enfin :

$$G(s, \alpha) = (1 - \alpha) + \frac{\alpha}{1 + \frac{\tau s}{\alpha}}$$

||
○

*Fonction de transfert du R.A avec court-circuit.
Le paramètre du modèle est α , la fraction du débit dans la Z.P.A.*

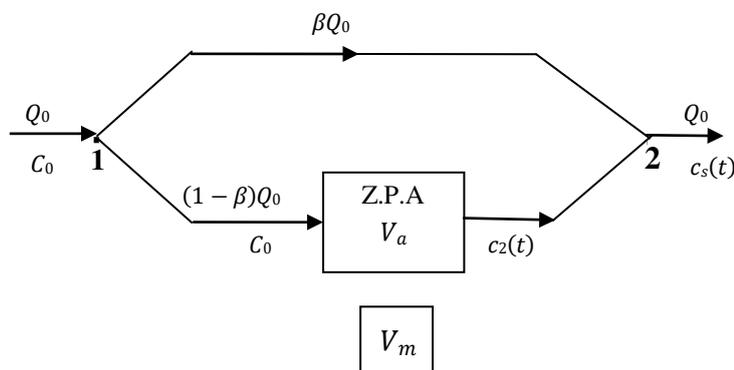
Chapitre II : Modélisation macroscopique de l'écoulement en réacteur réel

$$\mu_1 = (-1) \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial G}{\partial s}, \quad \mu_2 = (-1)^2 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2}$$

$$t_s = \tau, \quad \sigma^2 = \tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right)$$

2. Modèle à 2 paramètres

Exemple : Réacteur agité avec court-circuit et volume mort



Le bilan de traceur dans la Z.P.A, à un instant t après l'injection donne :

$$C_2 = c_0 + \frac{\alpha}{1-\beta} \tau \frac{dc_2}{dt} \quad \text{après intégration : } \frac{c_2}{c_0} = 1 - \exp \left[-\frac{\alpha}{1-\beta} \left(\frac{t}{\tau} \right) \right] \quad (1)$$

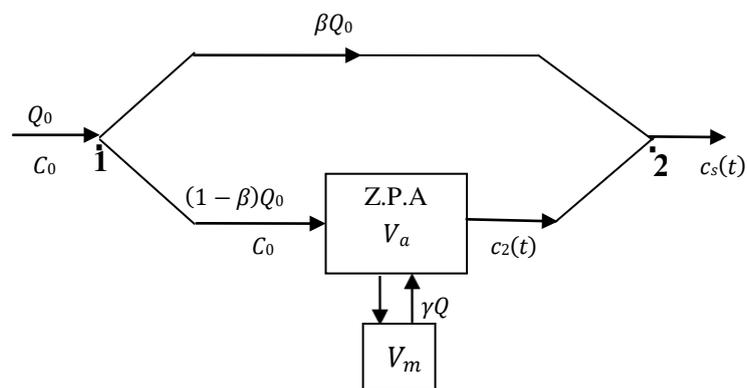
$$c_2 = f(c) ? \quad \text{le bilan au nœud 2 : } c_2 = \frac{c_s}{1-\beta} - \frac{\beta}{1-\beta} c_0, \quad \text{dans (1) : } \frac{c_0 - c_s}{c_0} = (1-\beta) \exp \left[-\frac{1-\beta}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right) \right] \quad \text{ou}$$

$$\text{encore } \frac{c_0}{c_0 - c_s} = \frac{1}{(1-\beta)} \exp \left[\frac{1-\beta}{\alpha} \left(\frac{t}{\tau} \right) \right] \quad \text{les deux paramètres du modèle sont } \beta \text{ et } \alpha \text{ (à déterminer)}$$

Reste à calculer les valeurs de α et β qui sont celles du modèle, à condition que celui-ci représente convenablement le réacteur réel. Pour vérifier ceci, il faut confronter les résultats expérimentaux aux résultats du modèle et déterminer par la même les paramètres α et β ; graphiquement on trace $\ln \left[\frac{c_0}{c_0 - c_s} \right]_{exp} = f(t)$, si le modèle représente bien le réacteur réel, on doit obtenir une droite. La pente et l'ordonnée à l'origine permettent la détermination de α et β .

3. Modèle à 3 paramètres

Exemple : Réacteur agité avec court-circuit et volume stagnant échangeant de la matière avec la Z.P.A



Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Introduction :

Construits en général sur les mêmes modèles que les réacteurs chimiques, ce sont des cuves ou enceintes en verre (pour les modèles de laboratoire) ou en acier inoxydable. Ils sont pourvus pour réaliser des réactions enzymatiques (réacteurs enzymatiques) ou des réactions à cellules (fermenteurs ou cytoculteurs). Les réacteurs biologiques sont aussi appelés bioréacteurs. Le bioréacteur permet de contrôler les conditions de culture (température, pH, aération, etc.), et de par ce fait, il permet de récolter des informations de plus grande fiabilité. Les bioréacteurs industriels permettent la fabrication de nombreux produits : bière, yaourts, vaccins, antibiotiques, anticorps, vitamines, acides organiques ...

Un fermenteur est construit en général sur le modèle d'un bioréacteur muni en plus d'un système d'aération. Cependant, le terme de fermenteur qui est parfois utilisé sans aucune distinction par rapport à celui de bioréacteur, permet de différencier le type de culture (bactérie, levure pour fermenteur et cellules animales pour bioréacteur).

Les bioréacteurs sont conçus tel qu'ils doivent assurer **4 grandes fonctions** :

- bons transferts de matière
- bon transfert de chaleur
- maintien de la stérilité
- suivi des paramètres et conduite de régulations

III.1-Réaction enzymatiques

La plupart des réactions biologiques sont catalysés par des substances particulières appelées « enzymes ». Ce sont des catalyseurs biologiques appartenant à la classe des protéines qui sont des polymères polypeptidiques. Ces macromolécules résultent de la polycondensation d'acide α -aminés du type : $\text{NH}_2\text{-CHR-COOH}$.

Dans les réactions enzymatiques le réactif s'appelle le substrat (S).

Mode de mise en œuvre

Lewis a généralisé la notion d'acide et de base par la définition suivante :

- Une substance pouvant accepter une paire d'électron (électrophile) est un acide
- Une substance pouvant céder une paire d'électron (nucléophile) est une base.

La présence de ces sites donneur-accepteur dans une substance permet la naissance de centre actif appelé sites actifs et qui sont à la base de beaucoup de réactions chimiques et biochimiques.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

La spécificité de la catalyse enzymatique est due à la nécessité, pour le substrat d'avoir une forme convenable pour venir occuper une place bien déterminée dans la protéine (site actif de la protéine), car l'enzyme engage le substrat dans un complexe avant de catalyser toute réaction. La molécule de substrat à transformer reconnaît le site actif et vient s'y fixer par des liaisons plus ou moins fortes.

Les sites actifs sont des groupements fonctionnels OH, N=C, etc.

Utilisation des enzymes

Les deux modes d'utilisation des enzymes sont soit sous forme d'enzyme soluble (le milieu est homogène) soit sous la forme insoluble et l'enzyme est immobilisée sur un support solide (le milieu réactionnel devient hétérogène). De là on peut étudier deux mécanismes cinétiques :

- La cinétique enzymatique homogène qui est régie par les lois de la catalyse homogène
- La cinétique enzymatique hétérogène qui est régie par les lois de la catalyse hétérogènes.

Réaction homogène et hétérogène

Cinétique enzymatique homogène

L'activité catalytique d'une enzyme dépend du pH (pH optimal). Cette activité augmente avec la température, selon la loi d'Arrhénius, mais au-dessus d'une température limite, la structure de la protéine est dénaturée et l'activité catalytique diminue. Une solution enzymatique possède un nombre fixe de sites catalytiques actifs auxquels le **substrat** peut se lier; aussi, à partir d'une certaine concentration en substrat, tous les sites sont occupés et la vitesse de réaction devient indépendante de la concentration en substrat.

La loi de vitesse de Michaelis et Menten est une des premières et des plus simples relations proposées pour modéliser la **cinétique des réactions enzymatiques** :

$$r = \frac{r_{\max} [S]}{K_m + [S]}$$

avec

- r ($\text{mole m}^{-3} \text{s}^{-1}$) vitesse de la réaction,
- r_{\max} ($\text{mole m}^{-3} \text{s}^{-1}$) vitesse maximale de la réaction,
- K_m (mol/m^3) constante de Michaelis et Menten,
- $[S]$ (mol/m^3) concentration en substrat.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

La vitesse maximale de la réaction r_{\max} est proportionnelle à la concentration enzymatique initiale de la solution (S_0). Cette forme de relation peut être expliquée par un mécanisme en deux étapes :

- La première étape est la formation rapide et équilibrée d'un complexe activé enzyme-substrat (ES^*)
- La seconde étape est la décomposition de ce complexe activé en produit (P) et enzyme régénéré (E).

La constante de Michaelis et Menten ; K_m mesure l'affinité de l'enzyme pour le substrat, qui est d'autant plus grande que la valeur de la constante est faible.

La relation de Michaelis et Menten ne peut pas traduire le comportement cinétique de toutes les réactions catalysées par des enzymes. Des relations plus complexes ont été développées pour rendre compte des **phénomènes d'inhibition** observés lorsque des molécules, autres que le substrat, peuvent se lier réversiblement sur les sites actifs des enzymes. Notons qu'il n'y sera pas question de cette partie dans ce cours.

Cinétique enzymatique hétérogène

Pour séparer facilement les enzymes des milieux liquides après réaction, on peut les fixer soit à la surface de particules non poreuses, soit à l'intérieur de particules poreuses. **On dit que les enzymes sont immobilisées.** L'immobilisation les rend plus stables grâce à la présence d'un microenvironnement favorable (température, pH...) et leurs liaisons avec le support. Les méthodes d'immobilisation enzymatique classiques sont décrites selon le mécanisme de fixation de l'enzyme au support. On distingue 3 principales méthodes d'immobilisation :

- L'immobilisation par adsorption
- L'immobilisation par liaison covalente
- L'immobilisation par inclusion

Les **lois de vitesse** sont de la même forme que celles non immobilisés, mais les vitesses r et r_{\max} s'expriment, lors d'une **fixation en surface**, en $\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ de surface de contact liquide-solide ou encore en $\text{mol.kg}^{-1}.\text{s}^{-1}$ de masse de support. Si l'enzyme est **incluse dans des particules poreuses**, les vitesses r et r_{\max} s'expriment en $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ de phase solide ou en $\text{mol.kg}^{-1}.\text{s}^{-1}$ de support.

Toutefois, lorsque les particules sont de **forme sphérique ou cylindrique**, le passage d'une unité à l'autre s'effectue simplement à partir de la taille et de la masse volumique des particules solides.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Les **concentrations en substrat** et **produit**, à prendre en compte dans les équations cinétiques, sont alors les concentrations à l'interface liquide-solide, dans le cas d'une immobilisation en surface, ou les concentrations dans la phase liquide qui imbibe les pores des particules solides, dans le cas d'une inclusion.

Dans les deux cas d'immobilisation, on doit tenir compte du phénomène de diffusion à l'interface liquide-solide ou gaz –solide.

La phase liquide ou gaz contient le substrat. La phase solide contient l'enzyme qui peut être sous forme de blocs, de membrane, de film ou de billes. Les différentes substances présente dans la phase liquide doivent être transportées (transférés) jusqu'à l'enzyme immobilisé. Ce transport de matière représente l'étape limitante de la cinétique : le transport n'est limitant que s'il franchie l'interface solide-liquide. C'est le phénomène de diffusion qui est décrit par la loi de Fick.

Diffusion de matière

Le flux de matière J est défini comme la quantité de matière (ou mole) qui traverse une section de surface (cm^2) pendant l'unité de temps (s).

La première loi de Fick dit que :

$$J = - D \text{ grad}[S]$$

D : coefficient de diffusion ou diffusivité moléculaire du soluté dans le solvant ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).

$\text{Grad } S$: gradient de concentration à l'endroit ou est déterminé le flux.

$$\text{grad}[S] = \frac{d[S]}{dx} \quad x : \text{direction de la diffusion}$$

Milieu plus

$\xleftarrow{\text{gradient de diffusion}}$

Milieu moins

Concentré en soluté

$\xrightarrow{\text{diffusion du solute}} \Rightarrow$

Concentré en soluté

Si l'enzyme est fixé à l'intérieur du solide (membrane), la diffusivité du substrat à l'intérieur du support peut être différente de la diffusivité de la molécule en solution, du fait d'interactions avec le support, on appelle D_{eff} cette diffusivité effective :

$$J = - D_{\text{eff}} \frac{d[S]}{dx}$$

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Réacteurs enzymatiques

Les réactions enzymatiques sont conduites généralement dans des réacteurs dont le choix du design et de la configuration est fait en considérant plusieurs paramètres tels que le type de la réaction mise en œuvre, la nature de la molécule d'intérêt, la quantité à produire, la forme de l'enzyme utilisée (libre ou immobilisée) et son coût. Ainsi, il existe des réacteurs industriels pour la catalyse homogène (enzymes libres) quand le coût du catalyseur est suffisamment faible pour permettre son utilisation unique et pour la catalyse hétérogène (enzymes immobilisées) qui permet la récupération et la réutilisation du catalyseur quand celui-ci est au contraire coûteux.

Fonctionnement discontinus

Dans les bioprocédés, les réactions sont généralement conduites dans des réacteurs fermés où le catalyseur (sous forme libre ou immobilisée) est mis en contact avec les substrats dans une cuve fermée agitée pendant un temps donné durant lequel le pH et la température sont contrôlés. La récupération des produits qui suit chaque cycle de biotransformation se fait, généralement, par filtration, par centrifugation ou par précipitation. Malgré sa simplicité, ce type de réacteur comporte plusieurs inconvénients inhérents aux réacteurs fermés tels que la variabilité de la qualité des produits, le coût de main d'œuvre lié à la fréquence des démarrages et des arrêts, l'utilisation de grands volumes, la perte des enzymes souvent actives en fin de cycle (pour les enzymes solubles) et la nécessité d'une étape supplémentaire de séparation des enzymes du milieu réactionnel.

Fonctionnement continu

Il existe, par ailleurs, plusieurs types de réacteurs enzymatiques qui fonctionnent en continu.

Parmi les différents réacteurs continus on distingue :

- Les réacteurs continus parfaitement agité
- Les réacteurs à lit fixe
- Les réacteurs à lit fluidisé
- Les réacteurs membranaires (REM)

Notons que les trois derniers types sont considérés comme étant des réacteurs en fonctionnement piston.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Réacteurs à limitation diffusionnelle

Transfert de matière liquide-solide dans le cas d'un film non poreux

C'est le cas d'une enzyme immobilisée à la surface d'un support. Il se produit un équilibre appelé couplage, entre la réaction biochimique et le transfert de matière liquide-solide entre la vitesse de la réaction enzymatique et la bioréaction. Ce couplage est observé lorsqu'un substrat réagit à la surface de particules solides sur lesquelles sont fixés une enzyme ou des micro-organismes. Le substrat se déplace du cœur de la phase liquide à l'interface liquide-solide où il est consommé par bioréaction. Un régime quasi-stationnaire est rapidement atteint, et la concentration en substrat à l'interface $[S_i]$ s'établit à une valeur telle que la vitesse de transfert de matière soit égale à la vitesse de la bioréaction. En choisissant ici, pour illustrer ce couplage, une réaction enzymatique obéissant à la loi cinétique simple de Michaelis et Menten, l'égalité des vitesses permet alors d'écrire :

$$k_l a' ([S] - [S_i]) = \frac{r_{\max} [S_i]}{K_m + [S_i]}$$

avec k_l (m/s) coefficient de transfert de matière liquide-solide,

a' (m²/kg) aire spécifique massique du solide (enzyme),

r_{\max} (mol.s⁻¹. kg⁻¹) vitesse spécifique maximale de bioréaction par unité de masse de support solide,

$[S]$ (mol/m³) concentration en substrat au cœur du liquide,

$[S_i]$ (mol/m³) concentration en substrat à l'interface liquide-solide,

K_m (mol/m³) constante de Michaelis et Menten

Après quelques transformations, la relation ci-dessus peut être mise sous forme adimensionnelle suivante :

$$\left(\frac{K_m + [S_i]}{[S]} \right) \left(1 - \frac{[S_i]}{[S]} \right) = \text{Da} \frac{[S_i]}{[S]}$$

avec $\text{Da} = \frac{r_{\max}}{k_l a' [S]}$ appelé : nombre de **Damkohler**

Le **nombre de Damkohler** représente le rapport entre la vitesse maximale de réaction et la vitesse maximale de transfert de matière. Transfert de matière et réaction étant en série, si leurs vitesses sont très différentes c'est le phénomène le plus lent qui sera l'étape limitante du processus.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

- Un nombre de Damkohler **très grand devant 1** ($Da \gg \gg 1$) correspond à une vitesse de réaction élevée devant la vitesse de transfert, ce dernier phénomène est donc limitant. La relation précédente montre alors que $[S_i]$ est très petit devant $[S]$ et la vitesse du processus est donc égale à $k_1 a' S$
- Un nombre de Damkohler **très petit devant 1** ($Da \ll \ll 1$) ; c'est la réaction biochimique qui est le phénomène limitant, $[S_i]$ est très voisin de $[S]$ et la vitesse du processus est donc égale à $\frac{r_{\max}[S]}{K_m + [S]}$

Quand le nombre de Damkohler n'est **ni très grand, ni très petit devant 1**, la relation ci-dessus, du second degré par rapport à $[S_i]$ permet le calcul de $\frac{[S_i]}{[S]}$

$$\frac{[S_i]}{[S]} = \frac{1}{2} \left(Da + \frac{K_m}{[S]} - 1 \right) \left(\pm \sqrt{1 + \frac{4 \frac{K_m}{[S]}}{\left(Da + \frac{K_m}{[S]} - 1 \right)^2}} - 1 \right)$$

Le signe à choisir devant la racine carrée est de manière à ce que le rapport soit positif. La concentration à l'interface en substrat $[S_i]$ permet alors le calcul du **facteur d'efficacité** η_e , défini classiquement comme le rapport entre la vitesse observée du processus en présence de la limitation différentielle et la vitesse maximale de réaction en absence de la limitation différentielle.

Ce facteur vaut ici :

$$\eta_e = \frac{\left(\frac{[S_i]}{[S]} \right) \left(1 + \frac{K_m}{[S]} \right)}{\left(\frac{[S_i]}{[S]} \right) + \left(\frac{K_m}{[S]} \right)}$$

On a bien sûr toujours intérêt à travailler avec un facteur d'efficacité proche de 1, en choisissant des conditions hydrodynamiques pour lesquelles la vitesse de transfert de matière est grande devant la vitesse de bioréaction (nombre de Damkohler très inférieur à 1).

Transfert de matière liquide-solide dans le cas d'un support solide poreux

Ce cas est observé lorsque des enzymes ou des micro-organismes sont inclus à l'intérieur de particules poreuses ou de gel ; on le rencontre aussi lors du développement de films microbiens (biofilm). Les phénomènes de transfert de matière intraparticulaire et de consommation de substrat par réaction sont ici simultanés et non successifs comme

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

précédemment. Il en résulte, à l'intérieur de la particule, un gradient de concentration en substrat et donc de vitesse de consommation de celui-ci.

En régime quasi-stationnaire, un bilan de matière différentiel sur le substrat conduit aux équations différentielles suivantes :

- en configuration sphérique (de rayon z)

$$D_{\text{eff}} \left(\frac{d^2[S]}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d[S]}{dz} \right) = r$$

- en configuration film plan :

$$D_{\text{eff}} \left(\frac{d^2[S]}{dx^2} \right) = r$$

avec les conditions aux limites suivantes :

- $[S] = [S_i]$ pour $x = L$ ou $z = R$; continuité de la concentration en substrat à l'interface liquide-solide ;
- $\frac{d[S]}{dz} = 0$ ou $\frac{d[S]}{dx} = 0$ pour $z = 0$ ou $x = 0$; arrêt de la diffusion au centre de la particule ou à l'extrémité du film.

Dans ces relations, L (m) représente l'épaisseur du film, R (m) le rayon de la particule, z et x les coordonnées courantes, $[S]$ (kg/m^3) la concentration en substrat dans la phase liquide qui imbibe le milieu solide poreux, $[S_i]$ (kg/m^3) la concentration en substrat dans la phase liquide à la surface de la particule, r ($\text{mol.s}^{-1} \cdot \text{m}^3$) la vitesse spécifique de bioréaction par unité de volume de support solide et D_{eff} (m^2/s) le coefficient de diffusion effectif du substrat dans le milieu poreux. Ce coefficient D_{eff} dépend de la diffusivité du substrat ainsi que de la tortuosité et de la porosité du solide.

A partir de la connaissance de la loi de vitesse : $r = r_m([S])$, la résolution des équations ci-dessus conduit au facteur d'efficacité η_e , défini comme le rapport entre la vitesse observée et la vitesse $r_m([S_i])$ qu'aurait la réaction biochimique en l'absence de gradient de concentration intra particulaire en substrat.

Dans le cas d'une bioréaction obéissant à la loi cinétique de Michaelis et Menten : Le **facteur d'efficacité** η_e est alors fonction du rapport $K_m/[S_i]$ et d'un **module de Thiele** défini :

— en configuration sphérique, par :
$$\Theta = \frac{R}{3} \sqrt{\frac{r_m}{D_{\text{eff}} K_m}}$$

— en configuration plane, par :
$$\Theta = L \sqrt{\frac{r_m}{D_{\text{eff}} K_m}}$$

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Les paramètres intrinsèques r_m et K_m de la bioréaction sont difficiles à déduire d'expériences de laboratoire, car les phénomènes de diffusion et de réaction ne peuvent jamais être découplés; un traitement numérique est nécessaire pour les extraire des variations de la vitesse observée en fonction de la concentration en substrat $[S]$.

III. 4. Dimensionnement des bioréacteurs

Lors de la mise en œuvre d'une bioréaction, la première étape consiste à dimensionner les différents éléments constitutifs du bioréacteur en vue d'optimiser le procédé. Dans le génie chimique et biochimique, l'opération de mélange est le paramètre critique du procédé responsable des phénomènes de transferts intervenant au sein du réacteur.

Agitation mécanique et force de cisaillement

Les **mobiles d'agitation**, dont le seul rôle est de mélanger la phase liquide, peuvent être classés en deux catégories: les mobiles cisailants et les mobiles non cisailants.

Pour l'agitation mécanique des cuves standards, il existe **deux types de mobiles d'agitation avec des propriétés différentes** :

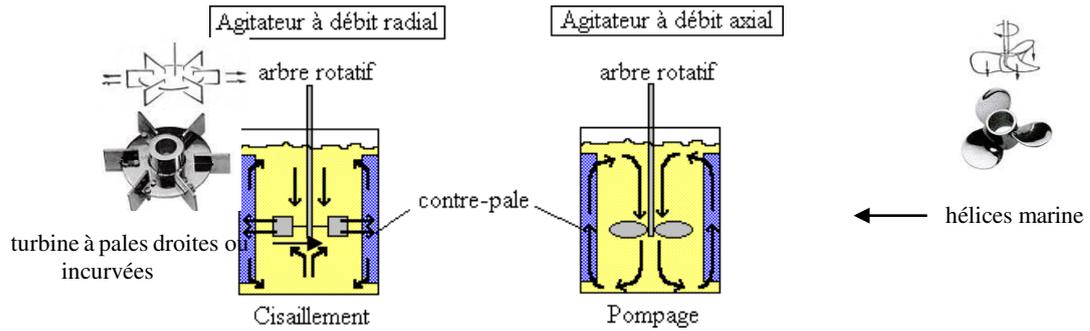
Mobile rotatif à débit radial (cisailant)

Le *mouvement* généré par cette turbine est radial, puis axial lorsque le liquide rencontre la paroi de la cuve, le cisaillement créé par la turbine accroît la turbulence et donc le mélange du liquide. Ce type d'agitation est traumatisant pour les cellules, il les projette contre les parois de la cuve ce qui entraîne un fort cisaillement et une bonne efficacité de transfert de l'oxygène, ce type de mobile convient bien aux bactéries et aux levures. ex : turbine à pales droites ou incurvées (six pales plates ou **turbine Rushton**).

Mobile rotatif à débit axial (non cisailant)

L'agitation génère un mouvement axial du liquide qui est moins traumatisant et peu de force de cisaillement. Grâce à une action de pompage, les cellules et le fluide sont poussés délicatement au fond de la cuve dans une sorte de tourbillon (comme pour l'hélice de bateau) puis ils remontent le long des parois. Les collisions et les zones stagnantes sont alors minimisées. Par contre, l'efficacité de transfert de l'oxygène n'est pas bonne. Ce type de mobile convient pour les cellules fragiles. ex : hélice type marine

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques



Pour les bioréacteurs fonctionnant nécessitant une aération, la circulation d'air joue les deux rôles (aération et agitation). On l'appelle l'agitation pneumatique ou **air-lift**. Elle est moins "traumatisante" pour les suspensions cellulaires très fragiles et elle est adaptée pour les processus aérobies. Le gaz d'oxygénation à lui seul crée la turbulence et permet le maintien des cellules en suspension homogène tout en assurant des transferts de matière corrects. La géométrie du bioréacteur est conçue avec soin de façon à ce que le transfert d'oxygène soit le plus efficace possible (la géométrie du fond de la cuve est de forme conique).

Par ailleurs, le volume de milieu ne constitue qu'une partie du volume total de la cuve. On garde environ 1/5^{ème} à 1/4 du volume total libre pour tenir compte de l'augmentation du volume due à l'injection d'air, à l'agitation et à la formation de mousse en cours de fermentation.

Temps de mélange

Le temps de mélange t_M est le temps pour rendre la phase liquide homogène en concentration à la suite d'une perturbation.

En régime turbulent t_M est donné par les relations :

- Pour une hélice marine

$$t_M = \frac{6 \left(\frac{d_c}{d_a} \right)^2}{N}$$

- Pour une turbine

$$t_M = \frac{4 \left(\frac{d_c}{d_a} \right)^2}{N}$$

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

On admet qu'un réacteur est parfaitement mélangé si le temps de mélange est supérieur au temps de demi-réaction.

En configuration standard, le temps t_M est atteint dès 55 tr/mn avec une hélice et dès 35 tr/mn pour une turbine.

Hydrodynamique des réacteurs

Nombres caractéristiques adimensionnels

Chacune de ces valeurs pouvant être exprimée à partir des trois unités fondamentales (masse, longueur, temps), le théorème de Vaschy-Buckingham permet de transformer l'expression de la puissance, dans une première approche, en 3 nombres adimensionnels liés les uns aux autres :

Le nombre de Reynolds (Re)

Il caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces de viscosité. **Re** permet de prédire le type d'écoulement laminaire ou turbulent ; En régime laminaire (**Re** < 10) ; En régime turbulent (**Re** > 10⁴)

$$\mathbf{Re} = \frac{d_a^2 N \rho_l}{\mu}$$

avec d_a (m) diamètre de l'agitateur,

N (tr/s) vitesse de rotation,

ρ (kg/m³) masse volumique du liquide,

μ (Pa.s) viscosité du liquide.

En régime laminaire, le produit $N_p \cdot \mathbf{Re}$ est constant ; en régime turbulent, c'est le nombre de puissance qui est constant : $N_p = 6$ pour la turbine et 0,4 pour l'hélice marine. L'hélice marine consomme donc moins de puissance que la turbine.

Le nombre de Froude (Fr)

Il caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces de gravité. **Fr** permet de prédire la formation d'un vortex

-si $\mathbf{Fr} \leq 1$ (pas de vortex),

-si $\mathbf{Fr} \geq 3$ (vortex),

$$F_r = \frac{N^2 d_a}{g}$$

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Avec

g : accélération de la pesanteur. $g = 9,81 \text{ m/s}^2$

Pour éviter la formation du vortex, les cuves sont équipées de contre-pales appelées : chicanes

Le nombre de Puissance (N_p)

Il caractérise le coefficient de trainée de l'agitateur dans le fluide et représente ainsi l'expression de la puissance consommée

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 d^5}$$

P (Watt): puissance mécanique consommée par le moteur de l'agitation

Le nombre de Weber (We)

il caractérise l'action des forces de tension superficielle.

$$We = \frac{\rho N^2 d_a^3}{\gamma}$$

Avec : γ : la tension superficielle (en kg.s^{-2} ou N.m^{-1})

Relation entre les nombres

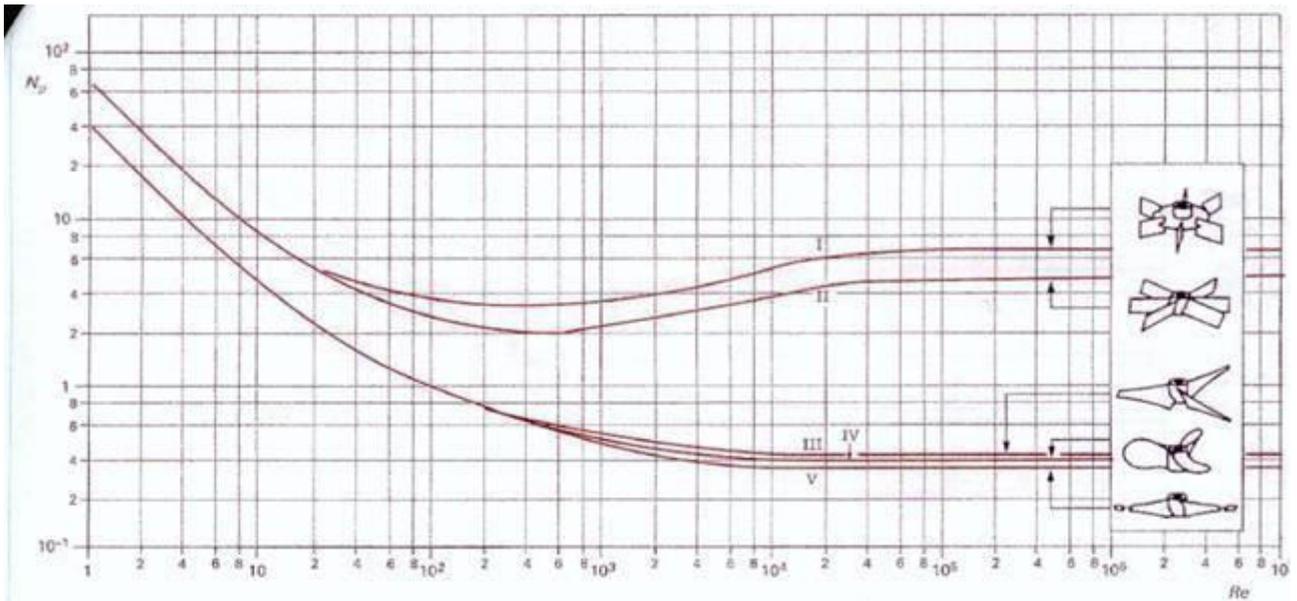
Ces quatre nombres sont reliés par l'équation suivante :

$$N_p = K (Re)^x (Fr)^y (We)^z$$

Avec K , x , y et z : paramètres reliés à la géométrie des agitateurs, ces paramètres sont obtenus par expérimentation.

Les caractéristiques de puissance N_p en fonction du type d'agitateur et en fonction du nombre de Reynolds sont données par la courbe caractéristique du mobile d'agitation.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques



Nombre de puissance de différents mobiles d'agitation en fonction du nombre de Reynolds

En régime laminaire, le produit $N_p \cdot Re$ est constant ; en régime turbulent, c'est le nombre de puissance qui est constant : $N_p = 6$ pour la turbine et $0,4$ pour l'hélice marine. L'hélice marine consomme donc moins de puissance que la turbine.

Cuve mécaniquement agitée standard

Cuve :

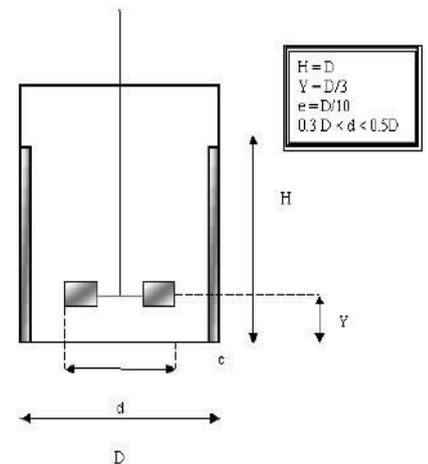
- Cuve cylindrique à fond plat.
- Hauteur de liquide (H) égale au diamètre de la cuve (D).
- Le rapport H/D peut être égal à 2 ou à 3 dans le cas de bioréacteurs aérés ou munis de plusieurs mobiles d'agitation.

Contre-pales :

- Nombre de contre-pales (n_p) = 4.
- Largeur des contre-pales (b) = D/12 ou D/10.
- Hauteur des contre-pales (h_b) = H.
- Écartement par rapport à la paroi de la cuve (e_b) = 0 ou 0,2D.

Mobiles d'agitation :

- Diamètre du mobile (d) = D/3.
- Distance par rapport au fond de la cuve (Y) = D/3.
- Le nombre de pales (n_p) et le rapport diamètre du mobile (d) sur largeur de la pale (l) sur hauteur de la pale (w) est fonction du type de mobile utilisé (pour une TD6 : $n_p = 6$ et $d/l/w = 20/5/4$)



Bioréacteur standard (cuve mécaniquement agitée)

Dans la pratique industrielle, les bioréacteurs sont construits sous de nombreuses formes de cuves et de mobiles d'agitation. La configuration appelée **cuve standard** assure une

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

bonne homogénéité de la phase liquide. Le rôle des contres pales appelés chicanes est d'éviter la formation d'un vortex autour de l'axe du mobile d'agitation.

Réacteurs à lit fixe

Un autre moyen d'augmenter la concentration bactérienne ou d'améliorer l'activité de l'enzyme consiste à les fixer sur des supports. Le support d'immobilisation sont des particules ou billes sur lesquelles sont immobilisés des cellules ou des enzymes. Il est compacté dans une colonne au travers de laquelle le milieu peut être injecté. Les deux extrémités du réacteur sont fermées par des grilles ou des plaques perforées et permettant la percolation d'une phase liquide, mais empêchant tout mouvement de la phase solide dispersée. L'alimentation peut se faire de bas en haut ou de haut en bas selon le type de construction.

Le réacteur à lit fixe permet à la fois d'avoir une importante productivité et un produit final exempt d'enzymes étant donné que celles-ci sont confinées dans le réacteur, évitant ainsi une étape finale de séparation du biocatalyseur et du produit.

Le réacteur à lit fixe constitue la configuration classique utilisée dans la conduite de réactions catalytiques hétérogènes à grande échelle. Il est cependant important de noter que ce réacteur conduit à une forte perte de charge ainsi qu'au risque de colmatage du lit et d'importantes limitations diffusionnelles ce qui réduit ses performances

Si les particules sont de forme sphérique, la fraction de réacteur occupée par la phase solide est de l'ordre de **0,6** et celle occupée par la phase liquide est de **0,4**

La **perte de charge** subie par le liquide à la traversée d'un lit de particules sphériques peut être estimée par la relation d'Ergun :

$$\frac{\Delta P}{H} = \frac{150 \mu_l U_l}{d_p^2} \frac{(1 - \varepsilon_l)^2}{\varepsilon_l^3} + \frac{1,75 \rho_l U_l^2}{d_p} \frac{(1 - \varepsilon_l)}{\varepsilon_l^3}$$

ΔP : perte de charge (Pa)

H : hauteur du lit (m)

d_p : diamètre des particules (m)

U_l : vitesse superficielle du liquide (m/s)

ε_l : fraction de lit occupée par la phase liquide égale à 0,4 max

μ_l : viscosité du liquide (Pa.s)

Réacteur à lit fluidisé

Les particules support avec leurs cellules fixées (ou enzymes) sont en mouvement, fluidisées par un flux d'écoulement.

Chapitre III : Bioréacteurs ou Réacteurs Enzymatiques

Il est constitué d'un tube de section circulaire rempli de particules solides actives, mais forcément placé verticalement et dont seule une extrémité est fermée par une grille ou une plaque perforée. L'activité est assurée par des bactéries ou des enzymes qui sont fixées sur un support mobile, particules granulaires fines et poreuses comme le sable ou le charbon actif. La phase liquide traverse le réacteur de bas en haut et comme les particules solides ne sont pas confinées, dès que la vitesse superficielle du liquide dépasse la valeur appelée vitesse minimale de fluidisation, le lit s'expand et les particules solides se déplacent librement à l'intérieur de la suspension liquide-solide. On dit alors que le lit est fluidisé; les particules solides sont animées d'un mouvement du flux ascendant rapide et régulier de l'effluent qui assure leur mélange.

Ce système minimise les phénomènes de colmatage des colonnes et d'emprisonnement des gaz produits. Il assure un meilleur transfert de matière et de chaleur.

Partie 2

Exercices corrigées sur

Génie de la réaction 1

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Série N°1

Exercice 1

La réponse d'un réacteur à une injection échelon-unité est représentée par les valeurs du tableau suivant pour un débit volumique donné.

t (sec)	0	15	25	35	45	55	65	75	95
C(t) (g.cm ⁻³)	0	0.5	1.0	2.0	4.0	5.5	6.5	7.0	7.7

1. Tracer la courbe représentant $E(t)$.
2. Calculer le temps de séjour moyen \bar{t}_s et la variance σ^2 de la DTS.

Exercice 2

Afin de déterminer la DTS d'un réacteur catalytique, on a réalisé une injection-impulsion d'un traceur radioactif à l'entrée de celui-ci, on a relevé la concentration du traceur à la sortie en fonction du temps. Les résultats obtenus sont les suivants :

t (min)	0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0
c(t) · 10 ³ (g · cm ⁻³)	0	5	22	27	26	22	19	15	10	7	4	3	3	1	0

1. Calculer les valeurs de E(t) et représenter son allure.
2. Calculer le temps de séjour moyen \bar{t}_s dans le réacteur.
3. Calculer σ^2 de la DTS.

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Série N°2

Exercice 1

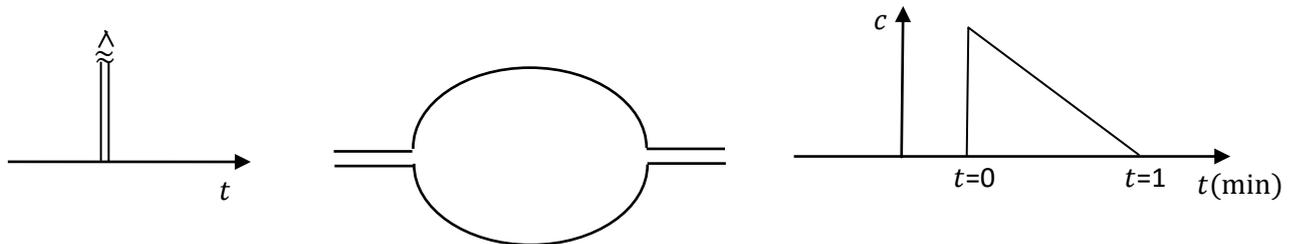
Pour étudier les caractéristiques de l'écoulement dans un réacteur ouvert, on introduit brièvement une petite quantité de traceurs dans le courant d'alimentation. On mesure ensuite sa concentration dans le courant de sortie à divers instants.

t (min)	0.1	0.2	1.0	2.0	5.0	10.0	30.0
c (g.l ⁻¹)	0.2	0.17	0.15	0.125	0.07	0.02	0.001

-A quel type de réacteur idéal, ce réacteur réel s'approche-t-il ?

Exercice 2

La réponse d'un réacteur à une injection-impulsion est donnée par l'allure de la courbe ci-dessous :



1. Etablir l'expression de la DTS dans le réacteur.
2. Calculer le temps de séjours moyen.
3. Quelle est la fraction du volume interne occupée par des molécules d'âge inférieur à 20 s.

Exercice 3

Considérons un réacteur parfaitement agité continu de volume V_R . La méthode des deux mesures (impulsion quelconque) est utilisée pour accéder à la DTS dans le réacteur.

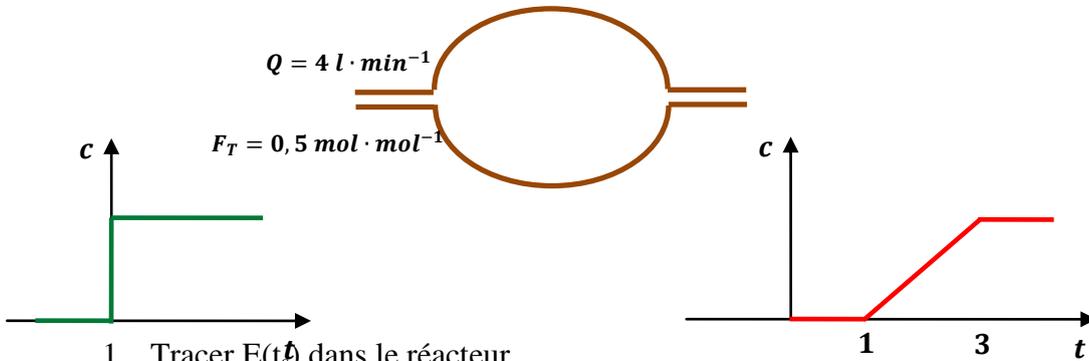
- 1- Décrire l'expérience en s'appuyant sur un schéma.
- 2- Ecrire le bilan transitoire de traceur. Donner la transformée de la Laplace de l'équation obtenue (table).
- 3- Trouver la fonction de transfert $G(s)$, $E(t_s)$ et $F(t_s)$ du réacteur parfaitement agité continu. Déduire μ_1 et σ^2 de la DTS.

Partie 1 : Exercices corrigés sur Génie de la réaction I

Série N°3

Exercice 1

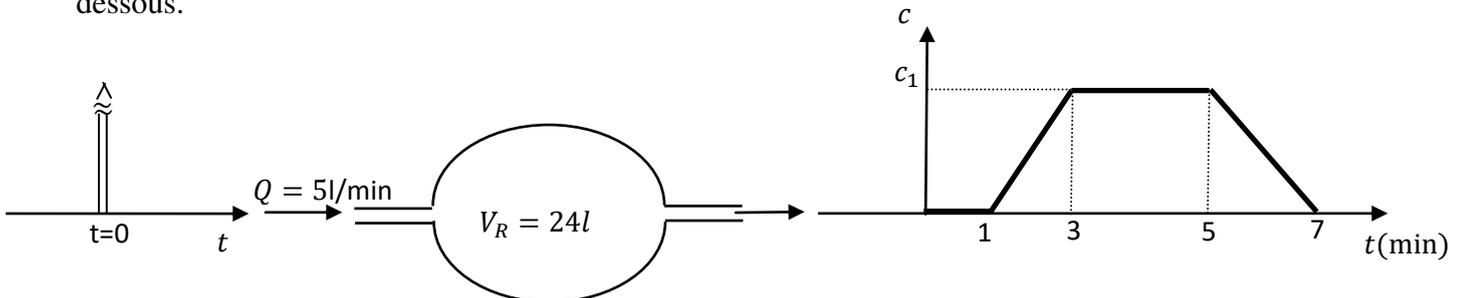
La réponse d'un réacteur à une injection-échelon est donnée par l'allure de la courbe ci-dessous :



1. Tracer $E(t)$ dans le réacteur.
2. Déterminer le temps de séjour moyen et le volume du réacteur V_R

Exercice 2

La réponse d'un réacteur à une injection-impulsion de type Dirac est donnée sur la figure ci-dessous.



1. Quel mauvais fonctionnement peut-on diagnostiquer ? Expliquer.
2. Calculer le paramètre caractéristique de ce mauvais fonctionnement.

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Série N°4

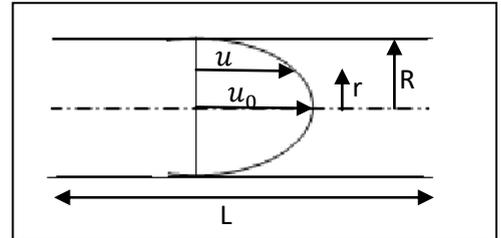
Problème

Soit un réacteur tubulaire en écoulement laminaire établi de longueur L . On suppose que l'écoulement est purement convectif en absence de toute diffusion.

Le profil de vitesse sur la section du réacteur

est parabolique : $u = u_0(1 - y^2)$.

où $y = \frac{r}{R}$ est la distance radiale à l'axe de tube, de rayon R .



La vitesse moyenne du fluide est $\bar{u} = \frac{u_0}{2}$. Avec u_0 est la vitesse maximale au centre du tube.

1. Déduire le temps de passage dans le réacteur.
2. Déterminer le temps de séjour en fonction de τ et y en supposant le modèle des filets en parallèle.
3. Etablir l'expression de la distribution de temps de séjour.
4. Tracer la courbe $E(t_s)$ dans le réacteur.
5. Déduire la fonction intégrale $F(t)$.

Série N°5

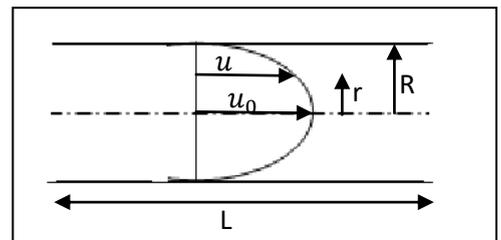
Problème

Soit un réacteur tubulaire en écoulement laminaire établi de longueur L . On suppose que l'écoulement est purement convectif en absence de toute diffusion.

Le profil de vitesse sur la section du réacteur

est parabolique : $u = u_0(1 - y^2)$.

où $y = \frac{r}{R}$ est la distance radiale à l'axe de tube, de rayon R .



La vitesse moyenne du fluide est $\bar{u} = \frac{u_0}{2}$. Avec u_0 est la vitesse maximale au centre du tube.

1. Déduire le temps de passage dans le réacteur.
2. Déterminer le temps de séjour en fonction de τ et y en supposant le modèle des filets en parallèle.
3. Etablir l'expression de la distribution de temps de séjour.
4. Tracer la courbe $E(t_s)$ dans le réacteur.
5. Déduire la fonction intégrale $F(t)$.

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Série N°6

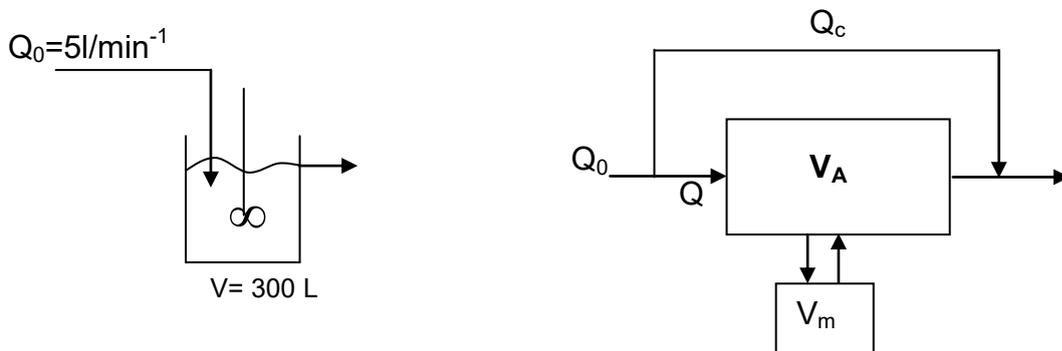
Exercice 1

Cholette et cloutier ont proposé de représenter un réacteur agité continu réel par le schéma de la figure ci-dessous. Le modèle comprend une zone en mélange parfait, une zone stagnante et un courant de court-circuit.

Dans une cuve agitée de 300 L parcourue par un débit de $5 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$, on effectue une expérience de purge-échelon avec un traceur coloré. On obtient les résultats suivants :

t (min)	$\frac{c}{c_0}$	t (min)	$\frac{c}{c_0}$
5	0.64	35	0.25
10	0.55	40	0.22
15	0.47	45	0.18
20	0.40	50	0.16
25	0.34	55	0.135
30	0.29	60	0.115

- Peut-on déduire la fraction stagnante et le débit de court-circuit ?



Exercice 2

On veut représenter l'écoulement dans un réacteur tubulaire par le modèle de l'écoulement piston avec dispersion axiale ouvert à la dispersion.

Le réacteur de volume $V_R = 30 \text{ m}^3$ et de longueur $L = 6 \text{ m}$ est alimenté avec un débit $Q = 750 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$. Les résultats de la mesure de la réponse du réacteur à une injection impulsion sont les suivants :

t_i (min)	5	10	20	30	40	50	60	80	100
c(t)	50	90	55	35	20	10	7	3	1

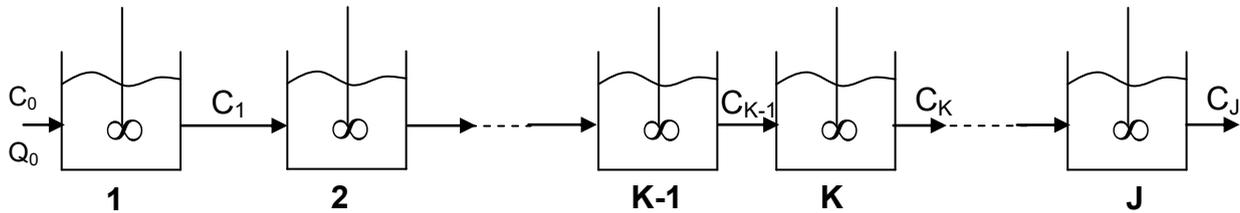
- Estimer la valeur du nombre de Peclet et déduire le coefficient de dispersion axiale D_A .

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Exercice 3

On peut représenter l'écoulement dans un réacteur réel en assimilant celui-ci à une cascade de J réacteurs agités en série de même volume total V_R .

Considérons la cascade de mélangeurs identiques ($V_k=V_R/J$) ci-dessous.



1. Ecrire le bilan transitoire de traceur dans le mélangeur de rang k et déduire sa fonction de transfert $g_k(s)$
2. Etablir l'expression de la fonction transfert de la cascade $G(s)$.
3. Etablir les expressions de μ_1 et σ^2 de la DTS de la cascade.
4. Sachant que le moment d'ordre 1 de la DTS expérimentale du réacteur réel est $\mu_1 = 60 \text{ min}$ et sa variance est $\sigma^2 = 900 \text{ min}^2$, calculer la valeur de paramètre J (paramètre du modèle).
5. Le modèle du réacteur en écoulement piston avec dispersion axiale peut-il être une bonne représentation de ce réacteur réel ? expliquer.

Indications :

$$g_k(s) = \frac{\bar{C}_k}{\bar{C}_{k-1}} \quad \text{avec} \quad \bar{C}_k = \mathcal{L}(C_k) : \text{la transformée de la place.}$$

$$\mathcal{L}\left(\frac{dC_k}{dt}\right) = s\mathcal{L}(C_k) - C_k(t=0).$$

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Série N°7

Exercice 1

Le tableau ci-dessous présente les résultats d'une mesure de DTS effectuée sur une cuve agitée de volume $VR=100m^3$ alimentée par un débit de fluide $Q=5m^3.h^{-1}$.

Temps(h)	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45
c(t)(u.a)	0	8.2	6.7	5.5	4.5	3.7	3.0	2.5	2.0	1.7
Temps(h)	50	55	60	65	70	75	80	85	90	95
c(t)(u.a)	1.4	1.1	0.9	0.7	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3	0.2
Temps(h)	100	105	110	115	120	125	130	135	140	145
c(t)(u.a)	0.2	0.2	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.0	0.0

1. Représenter graphiquement la réponse de réacteur c(t).
2. Quel type d'injection a-t-on réalisé ?
3. De quel type de réacteur idéal cette cuve agitée s'approche-t-elle ?
4. Estimer le temps de séjour moyen et discuter le résultat.
5. Proposer un modèle hydrodynamique pour représenter la cuve agitée. Déterminer le ou les paramètre(s) du modèle.

On donne : 1-

Modèle	G(s)
Z.P.A+court-circuit	$1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\tau}{\alpha} s}$
Z.P.A+court-circuit+Z.M	$1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\beta\tau}{\alpha} s}$
Z.P.A+court-circuit+Z.S	$1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{\alpha + \tau s \frac{1+\beta(1-\beta)\frac{\tau s}{\gamma}}{1+(1-\beta)\frac{\tau s}{\gamma}}}$

Z.P.A : zone parfaitement agitée, Z.M : zone morte et Z.S : zone stagnante.

2- $\mu_{2exp} = 1319.1 h^2$

3- Relation de Van Der Laan : $\mu_n = (-1)^n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^n G}{\partial s^n}$

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Série de TD N°8

Exercice 1

Dans un bioréacteur, on hydrolyse le sucrose à la température ambiante par catalyse enzymatique selon la réaction suivante



Avec un débit volumique constant Q de 25 litre/ mn et une concentration initiale C_{A0} en sucrose de 10 M, on obtient un taux de conversion X_A de 90 % de sucrose.

La vitesse r d'hydrolyse du sucrose est décrite par la loi de Michaelis-Menten de la forme :

$$r_A = \frac{k_1 C_A}{1 + K_M C_A} \quad (\text{mol}) \quad \text{avec } C_A \text{ concentration de sucrose}$$

(litre) (min)

M_A

ou $k_1 = 0,2 \text{ min}^{-1}$ et $K_M = 1,0 \text{ (mol/litre)}^{-1}$,

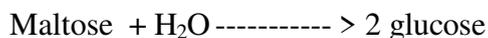
1- Ecrire le bilan matière du sucrose qui se décompose selon la réaction; sans variation de volume dans chacun des réacteurs suivant:

- Réacteur fermé uniforme
- Réacteur ouvert parfaitement mélangé en régime permanent
- Réacteur en écoulement piston en régime permanent

Calculer le temps de séjour ou de passage pour chacun des trois réacteurs. Conclure.

Exercice 2

La glucoamylase hydrolyse le maltose en glucose selon la réaction



On souhaite réaliser un réacteur enzymatique continu, impliquant la glucoamylase, enzyme (Enzyme michaelienne) ayant les paramètres cinétiques, déterminés à 40 °C, suivants: $r_{\max} = 0,02 \text{ mole de maltose (mn)}^{-1} \text{ (litre)}^{-1}$ et $K_M = 35 \text{ mmole /litre}$. On veut traiter en continu la solution de maltose à 1 mole/litre avec un débit de 1 litre/mn en ayant 95 % de conversion de maltose. Pour chaque cas, ci-dessous, faire un bilan massique (débit, volume du réacteur constants et régime permanent) et calculer le volume du réacteur à mettre en œuvre pour obtenir la conversion souhaitée.

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

1. dans le cas d'un réacteur parfaitement agité
2. dans le cas d'un réacteur piston.

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Exercice 3

On met en œuvre dans un réacteur enzymatique semi-continu l'hydrolyse d'une solution de saccharose par l'invertase. Déterminer le temps écoulé quand le volume du réacteur devient 10 fois égal au volume initial.

On donne :

- L'enzyme est michaelienne
- Concentration d'alimentation du substrat $S_0 = 50 \text{ g/l}$
- Concentration du substrat dans le réacteur $S_c = 10 \text{ g/l}$
- Volume initial du réacteur $V_0 = 1 \text{ litre}$
- Débit d'alimentation $Q = 5 \text{ l/h}$
- $K_M = 0,5 \text{ g/l}$
- Vitesse spécifique maximale de l'hydrolyse $r_{\max} = 2,5 \text{ g/h/mg d'enzyme}$
- Concentration d'enzyme $E = 2 \text{ mg/l}$

Exercice 4

Une solution de lactose est convertie par une β -galactosidase en glucose et galactose dans un réacteur agité continu

- Combien faut-il attendre pour atteindre le régime stationnaire ?
- Ecrire les équations des bilans matières du lactose et du glucose en régime dynamique.
- Comment varient les concentrations des différents composants du milieu à l'état stationnaire?
- Déterminer la relation entre la vitesse d'hydrolyse du lactose et la vitesse de production du glucose après la stabilisation du système.

Exercice 5

L'Acide 6-Aminopénicillanique (6-APA) sert de point de départ à la fabrication de nombreuses pénicillines synthétiques plus actives que la pénicilline naturelle. Il peut être synthétisé par action de la pénicilline amidase sur la benzylpenicilline. Un réacteur agité discontinu est utilisé pour la synthèse enzymatique de la 6-APA à partir de la benzylpenicilline.

- Ecrire les équations des bilans matières du substrat et du produit.
- On suppose que l'enzyme est Michaelienne et le volume du réacteur constant, déterminer la concentration du substrat en fonction du temps.
- Quel serait le temps nécessaire pour convertir 20 % de benzylpenicilline en 6-APA?

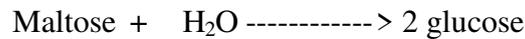
Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

On donne : $r_{\max} = 2 \text{ g/l/h}$, $S_0 = 200 \text{ g/l}$, $K_M = 10 \text{ g/l}$

Partie 1 : Exercices corrigées sur Génie de la réaction I

Exercice 6

La glucoamylase hydrolyse le maltose en glucose selon l'équation :



Les paramètres de la glucoamylase, déterminés à 40 °C sont $r_{\max} = 10 \mu\text{mol de maltose} \cdot \text{mn}^{-1}$ (mg d'enzyme)⁻¹ et $K_M = 35 \text{ mmol/l}$. L'hydrolyse enzymatique (Enzyme michaelienne) à 40 °C du maltose est mise en œuvre dans un réacteur discontinu de 1000 litres. La concentration initiale du maltose S_0 est de 1 mol/l et la concentration en enzyme E est de 1 g/l.

Quel est le temps nécessaire pour que le maltose soit hydrolysé à 99 %.

Problème 1

Une laiterie reçoit du lactosérum. Ce fluide contient du lactose et une quantité importante de protéines solubles. Il est prévu d'en faire un concentrat de protéines par ultrafiltration, puis de valoriser le perméat dans un bioréacteur en hydrolysant le lactose dans ce dernier en glucose et galactose. On suppose le volume du bioréacteur constant.

Il a été décidé d'effectuer l'ultrafiltration et l'hydrolyse enzymatique du lactosérum en continu (Réacteur Continu Parfaitement Mélangé CSTR). L'hydrolyse reçoit 46 894 litres par jour de lactose et on suppose que ce débit est constant. La concentration de lactose à l'entrée du réacteur est de 148,7 mM. A la fin de l'hydrolyse, 80 % de lactose sont transformés. Calculer le volume réactionnel à installer et la quantité d'enzyme (β -galactosidase) à mettre en œuvre si l'équation de la cinétique de l'hydrolyse enzymatique est de la forme

$$r_{Lac} = \frac{K_2 \cdot C_{Enz} \cdot C_{Lac}}{K_1 \left(1 + \frac{C_{OLac} = C_{Lac}}{K_1} \right) + C_{Lac}}$$

Nous allons admettre que le travail se fasse avec deux équipes à raison de 8 h/jour chacune. La durée de fonctionnement des installations est limitée à 10 h/j, le reste du temps étant consacré au nettoyage et à la maintenance.

Les paramètres ont les valeurs suivantes :

Paramètre	Valeur	Unité
K_1	3	mM
K_2	12,2	mmole.g ⁻¹ .min ⁻¹
K_m	53,9	mM
C_{Enz}	8	g.l ⁻¹
Débit volumique Q	10 ⁴	l.jour ⁻¹

C_{enz} est la concentration d'enzymes immobilisés avec laquelle nous allons travailler.

Exercice 2

Le tableau ci-dessous présente les résultats d'une mesure de DTS effectuée sur une cuve agitée de volume $V_R = 1,0 m^3$ alimentée par un débit de fluide $Q_0 = 0,1 m^3 \cdot min^{-1}$. L'injection étant un échelon de concentration $C_0 = 2000 mg \cdot l^{-1}$

t (min)	4	8	10	14	16	18
$c(t)$ (mg · l ⁻¹)	1000	1333	1500	1666	1750	1800

L'observation du fonctionnement de ce réacteur laisse penser qu'il existe un volume mort V_m et un débit de court-circuit Q_c .

1- Proposer un modèle hydrodynamique pour représenter la cuve agitée. On notera les fractions $\frac{V_a}{V_R} = \alpha$ et $\frac{Q_c}{Q_0} = \beta$. Etablir l'expression de la concentration de traceur à la sortie du modèle $c_s(t)$. Montrer que l'on peut linéariser cette expression sous la forme : $\ln \frac{C_0}{C_0 - c_s} =$

$$\ln \frac{1}{1 - \beta} + \left(\frac{1 - \beta}{\alpha} \right) \frac{t}{\tau}$$

On projette de mettre en œuvre dans la cuve agitée, la réaction du premier ordre : $A \rightarrow R + S$ de constante de vitesse $k = 0,28 min^{-1}$. Le courant alimentant le réacteur a une concentration $C_{A_0} = 2,0 kmol \cdot m^{-3}$.

2- Faire le calcul nécessaire pour prévoir la concentration c_{A_s} à la sortie.

Solution TD GRC SERIE N°1

Exercice 1

1. Calcul de E(t)

Dans le cas d'une injection-impulsion :

$$E(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{c(t)}{c_0}$$

Sachant que c(t) est donné reste seulement à calculer τC_0 .

On sait que E(t) est une fonction normmée donc $\int_0^\infty E(t)dt = 1$

$$\int_0^\infty E(t)dt = 1 = \frac{1}{\tau c_0} \int_0^\infty c(t) dt \text{ où } \tau c_0 = \int_0^\infty c(t) dt.$$

On discret, cette relation devient :

$$\tau c_0 = \sum_{i=1}^{15} c(t_i) \Delta t_i$$

Dans notre cas $\Delta t_i = 0.5$ (constante).

$$\tau c_0 = 0.5 \sum_{i=1}^{15} c(t_i)$$

AN: $\tau C_0 = 0.5(0 + 5.10^{-3} + 22.10^{-3} + \dots + 1.10^{-3} + 0)$

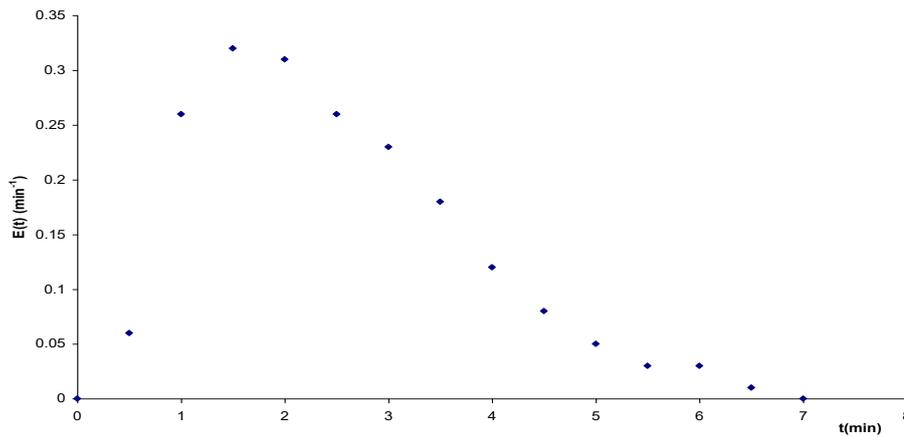
$$\tau c_0 = 82.10^{-3} (g/cm^3).min \text{ et } E(t) = \frac{c(t)}{82.10^{-3}}$$

Les valeurs de E(t_i) sont regroupés dans le tableau suivant :

t _i (min)	0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
c(t _i).10 ⁻³ (g/cm ³)	0	5	22	27	26	22	19	15
E(t _i) (min ⁻¹)	0	0.06	0.26	0.32	0.31	0.26	0.23	0.18

$t_i(\text{min})$	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0
$c(t_i).10^{-3} (\text{g/cm}^{-3})$	10	7	4	3	3	1	0
$E(t_i) (\text{min}^{-1})$	0.12	0.08	0.05	0.03	0.03	0.01	0.0

L'allure de $E(t)$:



2. Calcul du \bar{t}_s

$$\mu_n = \int_0^{\infty} t^n E(t) dt, \quad \mu_1 = \int_0^{\infty} t E(t) dt = \bar{t}_s$$

En discret : $\bar{t}_s = \sum_1^{15} t_i E(t_i) \Delta t_i, \Delta t_i = 0.5$

$$\bar{t}_s = 0.5 \sum_1^{15} t_i E(t_i)$$

$$\bar{t}_s = 0.5(0.5 \times 0.06 + 1.0 \times 0.26 + \dots + 6.0 \times 0.03 + 6.5 \times 0.01)$$

$$\bar{t}_s = 2.43 \text{ min}$$

Exercice 2

1. Calcul de $F(t)$ et de $E(t)$

Le type d'injection est une injection échelon unité donc

$$F(t) = \frac{C(t)}{C_0}$$

on cherche c_0

sachant que $E(t) = \frac{df}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{C(t)}{c_0} \right)$, $E(t) = \frac{1}{c_0} \frac{dC}{dt}$, $\int_0^\infty E(t) dt = \frac{1}{c_0} \int_0^\infty \frac{dC}{dt} = 1$,

$$c_0 = \int_0^\infty dC$$

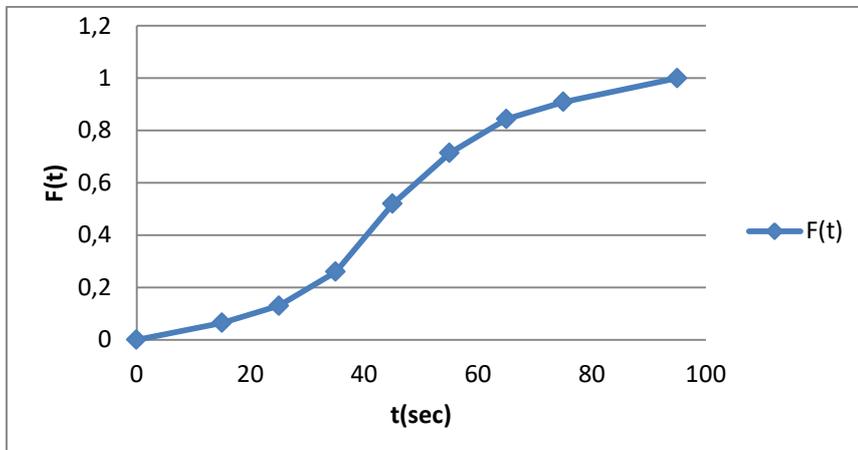
En discret on obtient : $c_0 = \sum_{i=1}^9 \Delta C_i$

$$c_0 = 0.5 + 0.5 + 1 + 2 + 1.5 + 1 + 0.5 + 0.7 \qquad c_0 = 7.7 \text{g/cm}^3$$

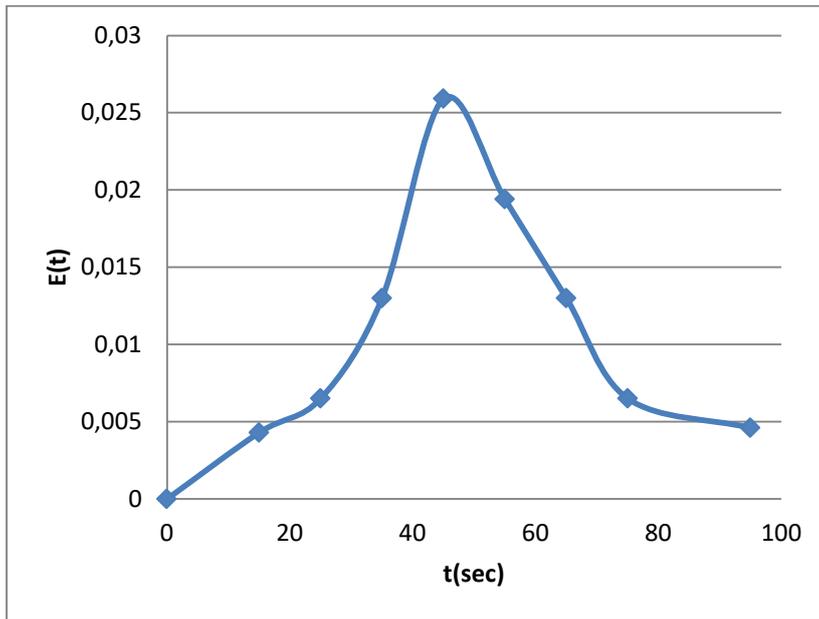
$$F(t_i) = \frac{C(t_i)}{7.7}, \quad E(t_i) = \frac{\Delta F_i}{\Delta t_i}$$

t(sec)	0	15	25	35	45	55	65	75	95
C(t _i)	0	0.5	1.0	2.0	4.0	5.5	6.5	7.0	7.7
F(t _i)	0	0.065	0.130	0.260	0.520	0.714	0.844	0.909	1.00
E(t _i)	0	0.0043	0.0065	0.0130	0.0259	0.0194	0.0130	0.0065	0.0046

- diagramme de F(t)



- diagramme de E(t)



2. Calcul du temps de séjour \bar{t}_s ?

$$\bar{t}_s = \int_0^{\infty} t E(t) dt, \text{ en discret : } \bar{t}_s = \sum_1^8 t_i E(t_i) \Delta t_i$$

$$\bar{t}_s = t_1 E(t_1)(t_1 - t_0) + t_2 E(t_2)(t_2 - t_1) + \dots + t_8 E(t_8)(t_8 - t_7)$$

$$\bar{t}_s = 15 \times 0.0043(15) + 25 \times 0.0065(10) + \dots + 95 \times 0.0046(20)$$

$$\bar{t}_s = \mathbf{51.5 \text{ sec}}$$

Solution TD GRC SERIE N°2

Exercice 1

1. L'expression de la DTS $E(t)$

D'après l'allure du signal de sortie (réponse) on constate qu'instantanément la concentration monte à une valeur maximale puis diminue avec le temps. Cela signifie que le nombre de moles injectés s'est parfaitement mélangé dans le volume V_R du réacteur ce qui correspond à son concentration dans le réacteur égale à $c_0 = \frac{n}{V_R}$.

Injection –impulsion (Dirac) : $E(t) = \frac{1}{\tau} \cdot C(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{C(t)}{c_0} \quad c(t)?$

D'après l'allure de la courbe : $c(t) = at + b$ (*droite*)

On connaît deux points de la droite : $(0, c_0)$ et $(1, 0)$

$$a = \frac{0 - c_0}{1 - 0} = -c_0, \quad b = c_0$$

D'où $c(t) = \begin{cases} c_0(1 - t) & 0 \leq t < 1 \\ 0 & t \geq 1 \end{cases}$

- τ ?

$$\int_0^\infty E(t)dt = \frac{1}{\tau C_0} \int_0^\infty c(t) dt = 1 \text{ d'où } \tau C_0 = \int_0^\infty c(t)dt.$$

$$\tau C_0 = \int_0^1 c_0(1-t)dt + \int_1^\infty 0dt, \quad \tau C_0 = c_0 t - \frac{c_0}{2} t^2 \Big|_0^1$$

$$\tau C_0 = \frac{c_0}{2} \text{ d'où } \tau = \frac{1}{2} \text{ min}$$

$$\text{Et donc } E(t) = \begin{cases} \frac{1-t}{\tau} & 0 \leq t < 1 \\ 0 & t \geq 1 \end{cases} \quad \left\{ \begin{array}{l} 2(1-t) \\ 0 \end{array} \right. \quad \begin{cases} 0 \leq t < 1 \\ t \geq 1 \end{cases}$$

$$E(t) = \begin{cases} 2(1-t) & 0 \leq t < 1 \\ 0 & t \geq 1 \end{cases}$$

Ou encore $E(t) = 2(1-t)[H(t) - H(t-1)]$

2. Calcul de temps de séjour \bar{t}_s

$$\mu_n = \int_0^\infty t^n E(t) dt, \quad \mu_1 = \int_0^\infty t E(t) dt = \bar{t}_s$$

$$\bar{t}_s = \int_0^\infty t E(t) dt = \int_0^\infty t \cdot \frac{c(t)}{\tau C_0} dt = \frac{1}{\tau C_0} \int_0^\infty t \cdot c(t) dt$$

$$\bar{t}_s = \frac{2}{C_0} \int_0^1 t c_0(1-t)dt + \int_1^\infty 0dt$$

$$\bar{t}_s = 2 \int_0^1 t(1-t)dt, \bar{t}_s = 2 \left[\frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{3} \right]_0^1, \bar{t}_s = 2 \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right]$$

$$\bar{t}_s = \frac{1}{3} \text{ min} = 20 \text{ sec}$$

3. $\frac{V}{V_R}$?

$$\frac{V}{V_R} = \int_0^{1/3} I(t)dt, \quad I(t)?$$

$$I(t) = \frac{1-F(t)}{\tau}, \quad F(t)?$$

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt, \quad F(t) = \int_0^t 2(1-t) dt$$

$$F(t) = \begin{cases} 2t - t^2 & 0 \leq t < 1 \\ 0 & t \geq 1 \end{cases}$$

$$I(t) = \begin{cases} 2(1 - 2t + t^2) & 0 \leq t < 1 \\ \frac{1}{\tau} = 2 & t \geq 1 \end{cases}$$

$$\frac{V}{V_R} = \int_0^{1/3} 2(1 - 2t + t^2) dt$$

$$\frac{V}{V_R} = 2 \left(t - t^2 + \frac{t^3}{3} \right) \Big|_0^{1/3}$$

$$\frac{V}{V_R} = 47\%$$

On remarque que 47% du volume du réacteur est occupé par de fluide dont l'âge est inférieur à 20sec.

Exercice 2

1. $E(t) = \frac{df}{dt}$ (injection-échelon)

$$F(t) = \frac{c(t)}{C_0}, \quad c_0, \quad c(t) ?$$

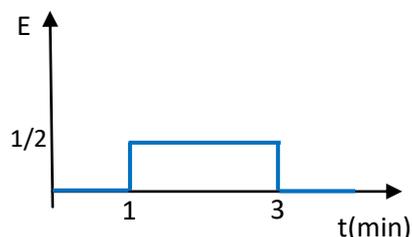
$$c(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t < 1 \\ at + b & 1 \leq t < 3 \quad a ? b ? \\ c_0 & t \geq 3 \end{cases}$$

On connait deux points de la droite : (1, 0) et (3, c₀)

$$a = \frac{c_0}{2}, \quad b = -\frac{c_0}{2}$$

$$c(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t < 1 \\ \frac{c_0}{2}(t - 1) & 1 \leq t < 3 \\ c_0 & t \geq 3 \end{cases} \quad \text{donc} \quad F(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t < 1 \\ \frac{1}{2}(t - 1) & 1 \leq t < 3 \\ c_0 & t \geq 3 \end{cases}$$

$$E(t) = \frac{dF}{dt} = \begin{cases} 0 & 0 \leq t < 1 \\ \frac{1}{2} & 1 \leq t < 3 \\ 0 & t \geq 3 \end{cases}$$



2. \bar{t}_s ?

$$\bar{t}_s = \mu_1 = \int_0^{\infty} t E(t) dt$$

$$\bar{t}_s = \int_0^1 t \times 0 dt + \int_1^3 t \times \frac{1}{2} dt + \int_3^{\infty} t \times 0 dt$$

$$\bar{t}_s = 0 + \frac{t^2}{4} \Big|_1^3 + 0$$

$$\bar{t}_s = \frac{9}{4} - \frac{1}{4}$$

$$\bar{t}_s = 2 \text{ min.}$$

$\tau = \bar{t}_s$ parceque le Fluideest incompressible donc fonctionnement de réacteur est bon.

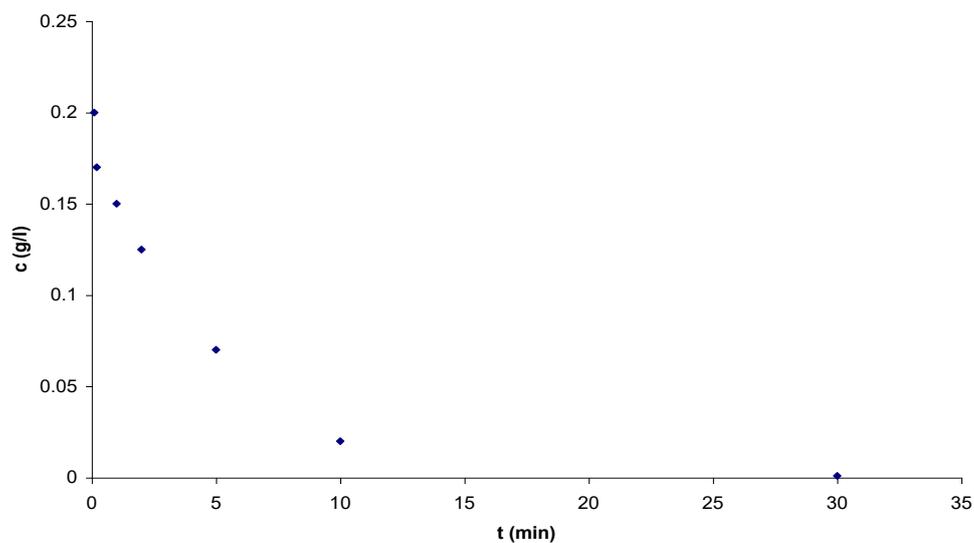
$$\bar{t}_s = \frac{V_R}{Q}, \quad V_R = \bar{t}_s \times Q, \quad V_R = 2 \times 4$$

$$V_R = 8l$$

Solution TD GRC SERIE N°3

Exercice N°1

- On trace $c(t) = f(t)$



-d'après l'allure du graphe on constate que le réacteur étudié s'approche du +réacteur parfaitement agité continu (R.P.A.C).

Exercice 2

1. Afin de constater le fonctionnement du réacteur réel, on réalise une comparaison entre τ et \bar{t}_s .

$$\tau = \frac{V_R}{Q}, \tau = \frac{24}{5}, \quad \tau = 4,8 \text{ min}$$

$$\bar{t}_s = \mu_1 = \int_0^{\infty} t E(t) dt = \int_0^{\infty} t \cdot \frac{c(t)}{\tau C_0} dt = \frac{1}{\tau C_0} \int_0^{\infty} t \cdot c(t) dt$$

$$c(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t \leq 1 \\ a_1 t + b_1 & 1 < t < 3 \\ c_1 & 3 < t < 5 \\ a_2 t + b_2 & 5 < t < 7 \\ 0 & t \geq 7 \end{cases} \quad c(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t \leq 1 \\ \frac{C_1}{2}(t-1) & 1 < t < 3 \\ c_1 & 3 < t < 5 \\ \frac{C_1}{2}(7-t) & 5 < t < 7 \\ 0 & t \geq 7 \end{cases}$$

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = \frac{1}{\tau C_0} \int_0^{\infty} c(t) dt = 1$$

$$\tau C_0 = \int_0^{\infty} c(t) dt = \int_1^3 \frac{C_1}{2}(t-1) dt + \int_3^5 c_1 dt + \int_5^7 \frac{C_1}{2}(7-t) dt$$

$$\tau C_0 = 4c_1$$

$$E(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t \leq 1 \\ \frac{1}{8}(t-1) & 1 < t < 3 \\ \frac{1}{4} & 3 < t < 5 \\ \frac{1}{8}(7-t) & 5 < t < 7 \\ 0 & t \geq 7 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \bar{t}_s = \int_0^1 t \times 0 dt + \int_1^3 t \times \frac{1}{8}(t-1) dt + \int_3^5 t \times \frac{1}{4} dt + \int_5^7 t \times \frac{1}{8}(7-t) dt \\ + \int_7^{\infty} t \times 0 dt \end{aligned}$$

$$\bar{t}_s = 0 + \frac{1}{8} \left(\frac{t^3}{3} - \frac{t^2}{2} \right) \Big|_1^3 + \frac{t^2}{8} \Big|_3^5 + \frac{1}{8} \left(-\frac{t^3}{3} + 7\frac{t^2}{2} \right) \Big|_5^7 + 0$$

$$\bar{t}_s = 4 \text{ min.}$$

$$\bar{t}_s(4 \text{ min}) < \tau(4,8 \text{ min})$$

Indique l'existence éventuelle du volume mort ou stagnant tel que $V_R = V_a + V_m$.

Comme $E(t)$ ne présente pas de trainee donc il s'agit d'un volume mort.

2. Calcul du paramètre caractéristique du mauvais fonctionnement :

$$1 = \frac{V_a}{V_R} + \frac{V_m}{V_R} ; 1 = \frac{Q\bar{t}_s}{Q\tau} + \frac{V_m}{V_R} ; \frac{V_m}{V_R} = 1 - \frac{\bar{t}_s}{\tau} ; \frac{V_m}{V_R} = 1 - \frac{4}{4.8} ; \frac{V_m}{V_R} = 17\%$$

Le volume mort représente 17% du volume total (17% du volume de réacteur est inaccessible au fluide).

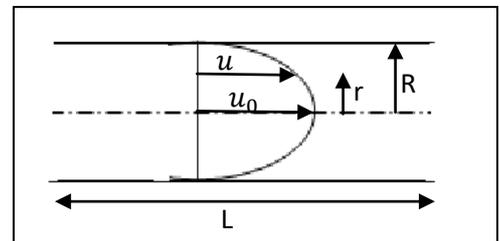
Solution TD GRC SERIE N°4

Exercice 1

1. Le temps de passage dans le réacteur est τ .

$$\tau = \frac{V}{Q} = \frac{\Omega L}{\Omega \bar{u}}$$
 avec Ω la section du tube.

D'où : $\tau = \frac{L}{\bar{u}}$



2. Le temps de séjour du filet de fluide situé à la distance relative « y » de l'axe du tube

$$\text{est : } t_s = \frac{dV_R}{dQ} = \frac{2\pi r dr L}{u 2\pi r dr}$$

$$t_s = \frac{L}{u} = \frac{L}{u_0(1-y^2)} = \frac{L}{2\bar{u}(1-y^2)}$$

D'où :

$$t_s = \frac{\tau}{2(1-y^2)}$$

3. Par définition de la distribution de temps de séjour DTS :

$$E(t_s) dt_s = \frac{dQ}{Q} = \frac{u 2\pi r dr}{\bar{u} \pi R^2} = \frac{u_0(1-y^2) 2r dr}{\bar{u} R^2} = 4y(1-y^2) dy \quad (*)$$

D'autre par, de l'expression de t_s , on tire : $(1-y^2) = \frac{\tau}{2t_s}$ et don $y = (1 - \frac{\tau}{2t_s})^{1/2}$

$$D'o\grave{u} \, dy = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tau}{2t_s}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(+ \frac{\tau}{2t_s^2}\right) dt_s$$

En reprenant la relation (*), il vient :

$$E(t_s)dt_s = 4\left(1 - \frac{\tau}{2t_s}\right)^{1/2} \times \frac{\tau}{2t_s} \times \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tau}{2t_s}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(+ \frac{\tau}{2t_s^2}\right) dt_s$$

On obtient enfin :

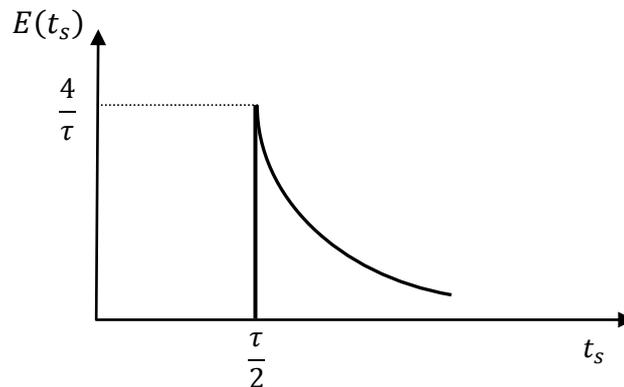
$$E(t_s) = \frac{\tau^2}{2t_s^3}$$

Mais il faut se rendre compte que le plus petit temps de séjour possible est $t_s = \frac{\tau}{2}$ correspondant au filet central, on obtient ainsi :

$$E(t_s) = \frac{\tau^2}{2t_s^3} H\left(t_s - \frac{\tau}{2}\right) \quad \text{avec } H\left(t_s - \frac{\tau}{2}\right) \begin{cases} = 0 & t_s < \frac{\tau}{2} \\ = 1 & t_s \geq \frac{\tau}{2} \end{cases}$$

4. La courbe de DTS ($E(t_s)$) dans le réacteur :

La DTS est constitué par un front raide à $t_s = \frac{\tau}{2}$ suivi d'une décroissance en t_s^{-3} .



5. la fonction intégrale $F(t)$:

$$F(t) = \int_{\frac{\tau}{2}}^t E(t)dt = 1 - \frac{1}{4} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{-2}$$

Exercice 2

- Pour le modèle à dispersion axial clos, l'expression de la variance est donnée par :

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = \frac{2}{P} - \frac{2}{P^2} (1 - e^{-P})$$

Avec $P = \frac{uL}{D_A}$ est le critère de Peclet défini sur la longueur du réacteur.

On calcule $\frac{\sigma^2}{\tau^2}$ de la réponse mesurée et on résout l'équation ci-dessus (en P)

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} ?$$

$$\sigma^2 = \mu'_2 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t}_s)^2 E(t) dt$$

$$E(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{c(t)}{c_0}$$

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = \frac{1}{\tau c_0} \int_0^{\infty} c(t) dt = 1$$

$$\tau c_0 = \int_0^{\infty} c(t) dt$$

$$E(t) = \frac{c(t)}{\int_0^{\infty} c(t) dt}$$

$$\text{d'où } \sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} (t - \bar{t}_s)^2 c(t) dt}{\int_0^{\infty} c(t) dt}$$

En discret :

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^9 (t_i - \bar{t}_s)^2 c(t_i) \Delta t_i}{\sum_{i=1}^9 c(t_i) \Delta t_i}, \quad \bar{t}_s ?$$

$$\bar{t}_s = \frac{\int_0^{\infty} t c(t) dt}{\int_0^{\infty} c(t) dt}$$

En discret

$$\bar{t}_s = \frac{\sum_{i=1}^9 t_i c(t_i) \Delta t_i}{\sum_{i=1}^9 c(t_i) \Delta t_i}$$

AN:

$$\bar{t}_s = \frac{5.50.5 + 10.90.5 + 20.55.10 + 30.35.10 + 40.20.10 + 50.10.10 + 60.7.10 + 80.3.20 + 100.1.20}{50.5 + 90.5 + 55.10 + 35.10 + 20.10 + 10.10 + 7.10 + 3.20 + 1.20}$$

$$\bar{t}_s = 25min$$

$$\sigma^2 = \frac{S}{50.5 + 90.5 + 55.10 + 35.10 + 20.10 + 10.10 + 7.10 + 3.20 + 1.20}$$

Avec :

$$S = [(5 - 25)^2 \cdot 50.5 + (10 - 25)^2 \cdot 90.5 + (20 - 25)^2 \cdot 55.10 + (30 - 25)^2 \cdot 35.10 + (40 - 25)^2 \cdot 20.10 + (50 - 25)^2 \cdot 10.10 + (60 - 25)^2 \cdot 7.10 + (80 - 25)^2 \cdot 3.20 + (100 - 25)^2 \cdot 1.20]$$

$$\sigma^2 = \frac{S}{50.5 + 90.5 + 55.10 + 35.10 + 20.10 + 10.10 + 7.10 + 3.20 + 1.20}$$

$$\tau^2 = \left(\frac{V_R}{Q}\right)^2$$

$$\tau^2 = \left(\frac{30}{750 \cdot 10^{-3}}\right)^2 = 40^2$$

$$\tau^2 = 1600min$$

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = 0.217$$

On a à résoudre

$$\frac{2}{P} - \frac{2}{P^2} (1 - e^{-P}) = 0.217$$

On donne des valeurs à P et on vérifie le résultat.

$$P = 7, \frac{\sigma^2}{\tau^2} = 0.224$$

$$P = 8, \frac{\sigma^2}{\tau^2} = 0.219 \text{ donc } P = 8 = \frac{uL}{D_A}$$

Le coefficient de dispersion axial D_A

$$\frac{uL}{D_A} = 8$$

$$D_A = \frac{u\delta}{8}$$

Solution TD GRC SERIE N°5

Exercice 1

- Le bilan de matière dans une association en parallèle donne :

$$c_s = \alpha c_E + (1 - \alpha)c_1$$

$G(s)$?

La transformée de Laplace (T.L) de l'équation de bilan de matière est :

$$\bar{c}_s = \alpha \bar{c}_E + (1 - \alpha)\bar{c}_1 (*)$$

\bar{c}_1 ? (T.L de c_1 : la concentration de traceur à la sortie de la zone parfaitement agitée).

-Le bilan de matière dans la zone parfaitement agitée : $c_E = c_1 + \frac{(1-\beta)V_R}{(1-\alpha)Q_0} \frac{dc_1}{dt}$

T.L de l'équation de bilan de matière dans la zone parfaitement agitée :

$$\bar{c}_E = \bar{c}_1 + \frac{(1 - \beta)}{(1 - \alpha)} \tau (s\bar{c}_1 - c_1(0)), c_1(0) = 0$$

$$\bar{c}_E = (1 + \frac{(1 - \beta)}{(1 - \alpha)} \tau s) \bar{c}_1$$

d'où $\bar{c}_1 = \frac{\bar{c}_E}{(1 + \frac{(1-\beta)}{(1-\alpha)} \tau s)}$ ($G_1(s) = \frac{1}{(1 + \frac{(1-\beta)}{(1-\alpha)} \tau s)}$) F.T de la zone P.A)

Dans l'équation (*) : $\bar{c}_s = \alpha \bar{c}_E + (1 - \alpha) \frac{\bar{c}_E}{(1 + \frac{(1-\beta)}{(1-\alpha)} \tau s)}$

D'où $\frac{\bar{c}_s}{\bar{c}_E} = G(s) = \alpha + \frac{(1-\alpha)}{(1 + \frac{(1-\beta)}{(1-\alpha)} \tau s)}$

La fonction de transfert du modèle hydrodynamique:

$$\bar{E} = G(s) \quad , \quad E = \mathcal{L}^{-1}(G(s))$$

$$G(s) = \alpha + \frac{(1 - \alpha)^2}{(1 - \alpha) + (1 - \beta)\tau s}$$

Relation de Van Der Laan $\mu_n^* = (-1)^n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^n G}{\partial s^n}$

$$\mu_1^* = (-1)^1 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial G}{\partial s}$$

$$\mu_1^* = - \lim_{s \rightarrow 0} \frac{-(1 - \beta)\tau(1 - \alpha)^2}{((1 - \alpha) + (1 - \beta)\tau s)^2}$$

$$\mu_1^* = (1 - \beta)\tau$$

$$\mu_2^* = (-1)^2 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2}$$

$$\mu_2^* = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{-(1 - \beta)\tau(1 - \alpha)^2}{((1 - \alpha) + \beta\tau s)^2} \right)$$

$$\mu_2^* = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{+(1 - \beta)\tau(1 - \alpha)^2 \times 2((1 - \alpha) + (1 - \beta)\tau s)(1 - \beta)\tau}{((1 - \alpha) + (1 - \beta)\tau s)^4}$$

$$\mu_2^* = \frac{+2((1 - \beta)\tau)^2}{(1 - \alpha)}$$

On a à résoudre deux équations à deux inconnues α et β : $\mu_1^* = (1 - \beta)\tau$

$$\sigma^2 = \mu_2 - \mu_1^2 = (1 - \beta)^2 \cdot \tau^2 \cdot \left(\frac{2}{1 - \alpha} - 1 \right) , \quad \sigma^2 = (1 - \beta)^2 \cdot \tau^2 \left(\frac{1 + \alpha}{1 - \alpha} \right)$$

Reste à calculer μ_1 et μ_2 expérimentaux.

t_i	$\frac{c}{c_0}$	$F_i = 1 - \frac{c}{c_0}$	$E_i = \frac{\Delta F_i}{\Delta t_i}$
t_1	$\frac{c_1}{c_0}$	$F_1 = 1 - \frac{c_1}{c_0}$	$E_i = \frac{F_1 - F_0}{t_1 - t_0}$
t_2	$\frac{c_2}{c_0}$	$F_2 = 1 - \frac{c_2}{c_0}$	$E_i = \frac{F_2 - F_1}{t_2 - t_1}$

$$\mu_1 = \sum_1 t_i E(t_i) \Delta t_i$$

$$\mu_1 = 16.275 \text{ min}$$

$$\mu_2 = \sum_1 t_i^2 E(t_i) \Delta t_i$$

$$\mu_2 = 522.125 \text{ min}^2$$

Exercice 3

1. Le bilan de matière du traceur s'écrit : $Qc_{k-1} = Qc_k + \frac{V_R}{J} \frac{dc_k}{dt}$

La fonction de transfert de ce mélangeur est $g_k(s) = \frac{\bar{c}_k}{\bar{c}_{k-1}} = \frac{1}{(1 + \frac{\tau}{J}s)}$

2. De proche en proche, on obtient pour toute la cascade :

$$G(s) = (1 + \frac{\tau}{J}s)^{-J}$$

3. On applique la relation de Van Der Laan pour obtenir μ_1 et σ^2 :

$$\mu_1 = (-1)^1 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial G}{\partial s} \text{ ce qui donne } \mu_1 = (-1)^1 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial s} (1 + \frac{\tau}{J}s)^{-J}$$

Ou encore $\mu_1 = - \lim_{s \rightarrow 0} -\tau (1 + \frac{\tau}{J}s)^{-(J+1)}$ enfin $\mu_1 = \tau$

$$\sigma^2 = \mu_2 - \mu_1^2 \text{ avec } \mu_2 = (-1)^2 \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2} \text{ on obtient } \mu_2 = \tau^2 \left(1 + \frac{1}{J}\right) \text{ et } \sigma^2 = \frac{\tau^2}{J}$$

4. L'ajustement du modèle s'obtient en écrivant $\mu_1 = (\mu_1)_{exp}$ et $\sigma^2 = (\sigma^2)_{exp}$

$$\text{D'où } J = \frac{(\mu_1)_{exp}^2}{(\sigma^2)_{exp}}$$

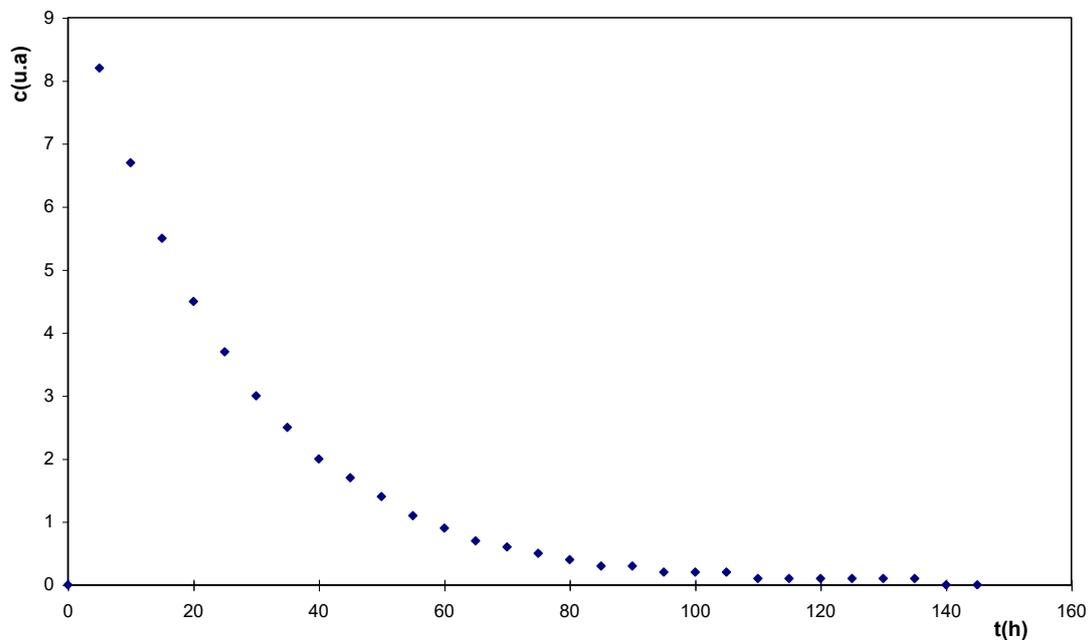
AN : $J = \frac{60^2}{900}$ ceci donne $J = 4$ (mélangeurs)

5. Le modèle du réacteur en écoulement piston avec dispersion axiale n'est pas une bonne représentation de ce réacteur réel car la dispersion y est importante (J faible).

Solution TD GRCII SERIE N°6

Exercice 1

Représentation graphique de la réponse de réacteur c(t).



1. L'allure de la courbe c(t) montre bien qu'il s'agit d'une réponse à une injection **impulsion de type Dirac**.
2. c(t) suit une décroissance exponentielle. Ceci indique que le comportement hydrodynamique de cette cuve agitée **s'approche de celui d'un R.P.A.C.**
3. \bar{t}_s ?

En discret

$$\bar{t}_s = \frac{\sum_i t_i c(t_i) \Delta t_i}{\sum_i c(t_i) \Delta t_i}$$

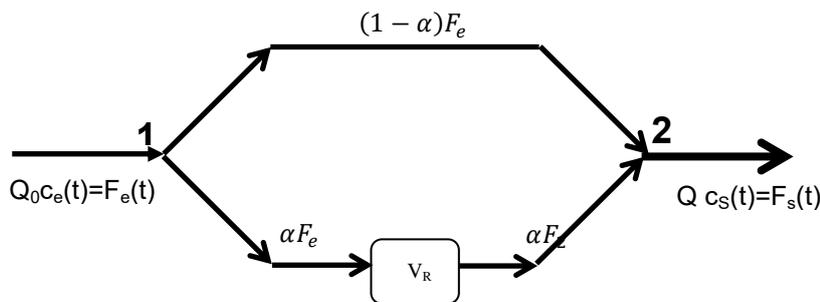
$$\bar{t}_s = \frac{6173}{226}$$

$$\bar{t}_s = 27.3h \text{ alors que } \tau = 20h \quad \left(\tau = \frac{100}{5} \right)$$

On constate que $\bar{t}_s > \tau$, on peut craindre un court-circuit non détecté car la première fraction est collectée à 5 heures après l'injection.

4. La cuve peut être représentée par une zone parfaitement agitée de même volume V_R avec un court-circuit de débit $(1 - \alpha)Q$.

C'est une association en parallèle de 2 branches :



$$G(s) = \frac{\bar{F}_s}{\bar{F}_e} \text{ avec } \bar{F}_s \text{ et } \bar{F}_e \text{ les T.L de } \bar{F}_s(t) \text{ et } \bar{F}_e(t)$$

$\bar{F}_s(t) = ?$ bilan au nœud 2 :

$$(1 - \alpha)F_e + \alpha F_2 = F_s \text{ sa T.L est } (1 - \alpha)\bar{F}_e + \alpha\bar{F}_2 = \bar{F}_s$$

$$G(s) = \frac{(1 - \alpha)\bar{F}_e + \alpha\bar{F}_2}{\bar{F}_e}$$

ou encore $G(s) = 1 - \alpha + \alpha \frac{\bar{F}_2}{\bar{F}_e}$

avec $\frac{\bar{F}_2}{\bar{F}_e} = G_1(s)$ la F.T de al Z.P.A

$$G_1(s)?$$

Bilan de matière dans Z.P.A :

$$\alpha F_e = \alpha F_2 + \frac{d}{dt} \left(V_R \frac{\alpha F_2}{\alpha Q} \right) \text{ ou encore } F_e = F_2 + \frac{V_R}{\alpha Q} \frac{dF_2}{dt}$$

Sa T.L est $\bar{F}_e = \bar{F}_2 + \left(1 + \frac{\tau}{\alpha} \right)$ d'où $G_1(s) = \frac{1}{1 + \frac{\tau}{\alpha} s}$

En fin $G(s) = 1 - \alpha + \frac{\alpha}{1 + \frac{\tau}{\alpha} s}$

En utilisant la relation de Van der Laan, on obtient :

$$\sigma_{th}^2 = \tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right) : \text{ la variance de DTS du modèle.}$$

Calculons la variance de la DTS de la cuve agitée. $\sigma_{exp}^2 = \mu_{2exp} - \mu_{1exp}^2$

$$\sigma_{exp}^2 = 573.1 \text{ h}^2$$

Le paramètre α est calculé à partir de l'équation $\tau^2 \left(\frac{2}{\alpha} - 1 \right) = 573.1$

d'où $\alpha = 0.82$.

Ce qui suggère que **18% du débit est court-circuité.**

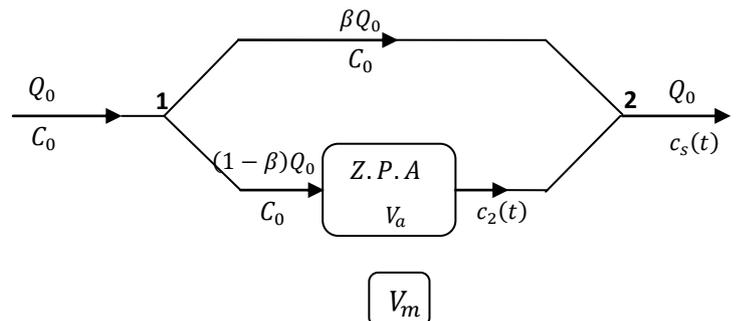
Remarque :

La valeur de σ_{exp}^2 n'est pas digne de confiance car la courbe de DTS est probablement tronquée dans les premières heures. Des expériences complémentaires avec des prélèvements plus fréquentes dans les 5 premières heures seraient nécessaires pour étayer ce modèle et affiner l'estimation.

Exercice 2

1-Expression de $c_s(t)$?

La cuve peut être représentée par une zone parfaitement agitée de volume $V_a = \alpha V_R$, avec un volume mort $V_m = (1 - \alpha) V_R$ et un court-circuit de débit $Q_c = \beta Q_0$.



Le bilan de traceur dans la Z.P.A , à un instant t après l'injection donne :

$$(1 - \beta)Q_0C_0 = (1 - \beta)Q_0c_2 + V_a \frac{dc_2}{dt}$$

Après réarrangement :

$C_0 = c_2 + \frac{\alpha}{1-\beta} \tau \frac{dc_2}{dt}$ Eq. diff. du 1^{er} ordre avec second membre dont la solution est :

$$\frac{c_2}{C_0} = 1 - \exp\left[-\frac{1-\beta}{\alpha}\left(\frac{t}{\tau}\right)\right] \quad (1)$$

Il reste à exprimer c_2 en fonction de c_s en écrivant le bilan au nœud

$$2 : \beta Q_0 C_0 + (1 - \beta) Q_0 c_2 = Q_0 c_s$$

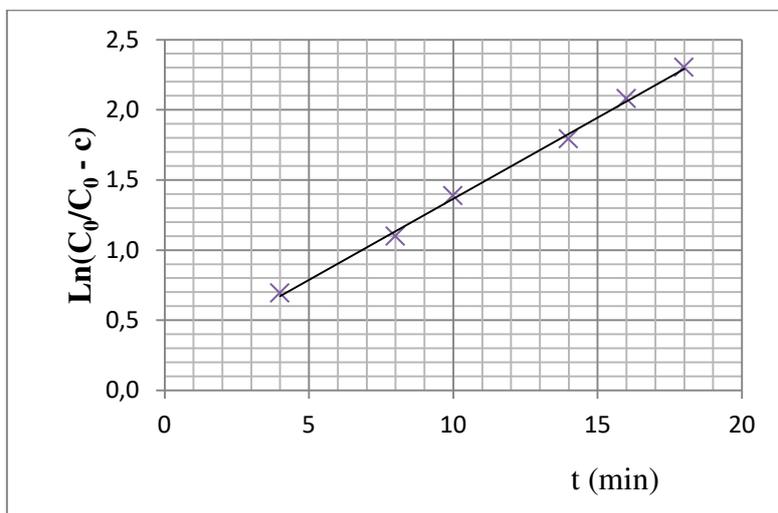
$$c_2 = \frac{c_s}{1-\beta} - \frac{\beta}{1-\beta} C_0 \text{ en remplaçant dans l'éq. (1), on obtient } \frac{c_0 - c_s}{C_0} = (1 - \beta) \exp\left[-\frac{1-\beta}{\alpha}\left(\frac{t}{\tau}\right)\right]$$

en inversant : $\frac{C_0}{c_0 - c_s} = \frac{1}{(1-\beta)} \exp\left[\frac{1-\beta}{\alpha}\left(\frac{t}{\tau}\right)\right]$, en linéarisant, il vient : $\text{Ln } \frac{C_0}{c_0 - c_s} = \ln \frac{1}{1-\beta} + \left(\frac{1-\beta}{\alpha}\right) \frac{t}{\tau}$

1- Le bilan du réactif A en régime permanent dans la Z.P.A et le bilan au nœud 2 donnent :

$$\frac{C_{As}}{C_{A0}} = \beta + \frac{(1-\beta)^2}{(1-\beta) + \alpha k \tau} \quad , \quad \alpha ? \beta ?$$

Reste à calculer les valeurs de α et β qui sont celles du modèle, à condition que celui-ci représente convenablement le réacteur réel. Pour vérifier ceci, il faut confronter les résultats expérimentaux aux résultats du modèle et déterminer par la même les paramètres α et β ; graphiquement on trace $\text{Ln } \left[\frac{C_0}{c_0 - c_s} \right]_{exp} = f(t)$, si le modèle représente bien le réacteur réel, on doit obtenir une droite.



$$b = \ln \frac{1}{1-\beta} = 0,22 ,$$

$$\beta = 0,2$$

$$\text{tg} \alpha = \frac{1-\beta}{\alpha \tau} = 0,115 ,$$

$$\alpha = 0,7$$

$$C_{As} = 0,86 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$$

Enfin

$$X_{As} = 0,57$$

Références bibliographiques:

1. *Levenspiel O : chemicalreaction engineering, 3^{eme}édition, John Wiley and Sons, New York (1998) ISBN : 0471225424X*
2. *Villiermaux J : Génie de la réaction chimique, conception et fonctionnement des réacteurs, 2^{eme} édition, Tec & Doc Lavoisier , Paris (1993) ISBN : 2-85206-132-5*
3. *Schweich D : génie de la réaction chimique, Tec ! Doc lavoisier (2001) ISBN : 2-7430-0459-2*
4. *Froment G and BischoffKB : Chemical reactor, analysis and design : John Wiley and Sons, New York (1979) ISBN : 978-0471510-444*
5. *P.trambouze : les réacteurs chimiques : conception / calcul/mise en œuvre, Editions Technip(Paris) 1984*
6. *R.W.Missen : chemicalreaction engineering and kinetics, Edition John Wiley and Sons, Inc, New York, 1999*

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة أحمد دراية - آدرار

كلية العلوم والتكنولوجيا



الرقم: 01/.../ج.أ.ك.ع.ت/ق.م.ط.م/2023

شهادة إفادة

يشهد رئيس اللجنة العلمية لقسم المحروقات والطاقات المتجددة وبناء على محضر اللجنة العلمية لقسم

المحروقات والطاقات المتجددة رقم 2023/02 المؤرخ في 05 مارس 2023 بأن :

الدكتور : سقماش منير

المولود ب: 26 - 01 - 1990 ب ولاية بسكرة

الرتبة : أستاذ محاضر - أ

قدم مطبوعة محاضرات في المقياس « **Génie de la réaction chimique 1** » تحتوي على 83 صفحة

موجهة لطلبة السنة الأولى ماستر تخصص هندسة كيميائية , تم إعتماده على مستوى اللجنة العلمية للقسم.

سلمت هذه الشهادة للمعني بطلب منه لإستعمالها في حدود ما يسمح به القانون.

آدرار في : 2023 / 05 / 30

رئيس اللجنة العلمية

د. لكصاسي حمزة
رئيس اللجنة العلمية لقسم
المحروقات و الطاقات المتجددة